

RECEȚIONAT

Agenția Națională pentru Cercetare
și Dezvoltare _____
_____ 2020

AVIZAT

Secția AȘM _____
_____ 2020

RAPORT ANUAL

privind implementarea proiectului din cadrul Programului de Stat (2020-2023)

Noi materiale uni-, bi- și tridimensionale cu proprietăți magnetice, optice și
dielectrice dirijate pe baza metalelor de tranziție,

20.80009.5007.19

Prioritatea Strategică: Competitivitate economică și tehnologii inovative

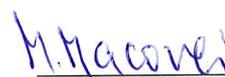
Conducătorul proiectului

Culiuc Leonid



Directorul organizației

Macovei Mihai



Consiliul științific

Macovei Mihai



L.S.



Chișinău 2020

1. Scopul etapei anuale conform proiectului depus la concurs

Elaborarea tehnologiilor de sintetizare și creștere a monocristalelor, caracterizarea structurală și magnetică a compușilor $\text{GaV}_4\text{S}(\text{Se})_8$ cu structura spinel lacunară și a compușilor $\text{Co}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$ cu structura hexagonală cu proprietăți multiferoice.

Elaborarea regimurilor tehnologice de sintetizare și creștere a cristalelor de $\text{MoS}(\text{Se})_2$ și $\text{WS}(\text{Se})_2$ dopate cu crom și vanadiu care, concomitent, conțin molecule de halogen înglobate în interstițiul van der Waals al compușilor lamelari.

Elucidarea originii crossoverului de spin observat în compusul $[\text{Fe}^{\text{II}}(\text{EtL})_3](\text{PF}_6)_2$ care conține ionii Fe^{II} în înconjurarea octaedrică a ionilor de sulf

2. Obiectivele etapei anuale

1. Elaborarea tehnologiilor de creștere a monocristalelor $\text{GaV}_4\text{S}(\text{Se})_8$, $\text{Co}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$.
2. Elaborarea tehnologiilor de creștere a cristalelor 3D de compuși TX_2 lamelari dopați cu metale de tranziție diferite de Mo și W.
3. Elaborarea modelului crossover-ului de spin în compusul $[\text{Fe}^{\text{II}}(\text{EtL})_3](\text{PF}_6)_2$

3. Acțiunile planificate pentru realizarea scopului și obiectivelor etapei anuale

Sintetizarea probelor GaV_4S_8 , GaV_4Se_8 și $\text{Co}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$ policristaline. Creșterea monocristalelor prin metodele reacțiilor chimice de transport. Studiul structural prin difracția cu raze X. Magnetometria SQUID. Determinarea parametrilor principali structurali și magnetici.

Creșterea cristalelor TX_2 dopate cu crom și vanadiu prin metoda reacțiilor chimice de transport, utilizând iodul și clorul în calitate de agent transportor. Estimarea concentrațiilor dopanților și a moleculelor de iod și clor în rețeaua cristalină gazdă. Stabilirea condițiilor tehnologice ce asigură intercalarea controlată a cristalelor cu molecule de halogen (I_2 , Cl_2). Elaborarea procedurilor de obținere a nano-straturilor cristaline 2D prin exfoliere și caracterizarea optică a acestor straturi.

Calcululele DFT ale energiilor într-un singur punct asociate cu un sistem multielectronic sub acțiunea potențialului creat de o aranjare dată de atomi, în funcție de temperatură pentru compusul $[\text{Fe}^{\text{II}}(\text{EtL})_3](\text{PF}_6)_2$ de tip tris(chelate), calculul proprietăților magnetice ale acestui compus, precum și ale caracteristicilor magnetice ale compușilor GaV_4S_8 , GaV_4Se_8

4. Acțiunile realizate pentru atingerea scopului și obiectivelor etapei anuale

A fost elaborată tehnologia de sintetizare a probelor policristaline a compușilor GaV_4S_8 , GaV_4Se_8 și $\text{Co}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$. Au fost elaborate regimurile tehnologice de creștere a monocristalelor ale acestor compuși prin metoda reacțiilor chimice de transport. A fost efectuată analiza structurală prin difracția cu raze X și cercetate proprietățile magnetice ale cristalelor obținute.

Au fost montate noi cuptoare tehnologice uni- și bizonale echipate cu sisteme electronice de reglare precisă a temperaturii și ajustate regimurile termice optime pentru asigurarea procesului de creștere a cristalelor. Prin metoda reacțiilor chimice de transport au fost obținute cristale de MoS_2 , MoSe_2 și WSe_2 dopate cu crom și vanadiu, concomitent intercalate cu molecule de clor și iod. Au fost efectuate caracterizările optice, structurale și fizico-chimice spre a determina conținutul dopanților și a moleculelor de halogen în materialele gazdă. A fost asigurată logistica necesară pentru prepararea monostraturilor atomice de TX_2 prin exfoliere mecanică și întreprinse multiple manipulații, care au permis obținerea nano-straturilor cristaline 2D, identificate cu ajutorul spectroscopiei fotoluminescente (FL) la temperaturi joase.

In cadrul teoriei funcționalei de densitate (DFT) cu ajutorul pachetului ORCA au fost elaborate programe pentru calculul energiilor într-un singur punct atât pentru cationul $[\text{Fe}^{\text{II}}(\text{EtL})_3]^{2+}$ cât și pentru molecula neutră $[\text{Fe}^{\text{II}}(\text{EtL})_3](\text{PF}_6)_2$. Pentru explicarea proprietăților magnetice ale complexilor menționați a fost elaborat modelul microscopic bazat pe formalismul Schrödinger. De asemenea s-a început lucrul asupra elaborării modelului pentru descrierea caracteristicilor magnetice ale compușilor GaV_4S_8 și GaV_4Se_8 recent obținuți.

5. Rezultatele obținute

Au fost crescute monocristale perfecte ale compușilor GaV_4S_8 , GaV_4Se_8 cu structura spinel lacunară și a compusului $\text{Co}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$ cu structura hexagonală și proprietăți multiferoice. Studiul cu raze X a evidențiat structura cubică cu simetria $F43m$ la temperaturi înalte pentru compușii $\text{GaV}_4\text{S}(\text{Se})_8$ și structura hexagonală, grupul spacial $P6_3mc$ pentru compusul $\text{Co}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$. Cercetările magnetizării și capacității termice au depistat tranziții Jahn-Teller și magnetice consecutive în compușii $\text{GaV}_4\text{S}(\text{Se})_8$ la temperaturi joase, iar pentru compusul $\text{Co}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$ a fost evidențiată ordonarea antiferromagnetică la temperaturi mai joase de 40 K.

Au fost crescute cristale lamelare de MoS_2 , MoSe_2 și WSe_2 dopate cu crom și vanadiu și, concomitent, intercalate cu molecule de clor ($\text{MoS}_2:\text{Cl}_2$) și iod ($\text{MoSe}_2:\text{I}_2$, $\text{WSe}_2:\text{I}_2$). Au fost efectuate caracterizările optice (spectroscopiile fotoluminescentă (FL) și împrăstierii Raman) structurale (difracția de raze X) și fizico-chimice (fluorescența de raze X) spre a determina conținutul dopanților și a moleculelor de halogen în materialele gazdă. În spectrele de FL ale cristalelor dopate cu Cr și V fost depistate noi benzi în domeniul infraroșu (IR), iar spectrele Raman, obținute la excitarea cu lumină laser IR, au permis identificarea liniilor spectrale cauzate de modurile vibraționale ale moleculelor de halogen. Prin exfoliere mecanică au fost preparate monostraturi atomice de $\text{WS}_2:\text{Br}_2$, identificate prin spectroscopia FL.

Rezultatele calculului DFT ale energiilor într-un singur punct în funcție de temperatură pentru cationul $[\text{Fe}^{\text{II}}(\text{EtL})_3]^{2+}$ și molecula neutră $[\text{Fe}^{\text{II}}(\text{EtL})_3](\text{PF}_6)_2$ au demonstrat că pentru stările $\text{Fe}(\text{II})$ cu diferite valori de spin aceste energii calculate cu ajutorul datelor structurale experimentale de temperatură variabilă permit reproducerea cursului transformării spinului și construirea imaginii transparente a acestei transformări în compușii sus menționați. Independent de fapt dacă molecula este neutră sau încărcată pozitiv, tranziția între stările cu spin 0 și 2 are loc la temperaturi mai înalte decât 250K, iar starea complexilor cu spinul $S=1$ nu participă în transformarea spin crossover. În cadrul modelului microscopic elaborat de asemenea au fost interpretate proprietățile magnetice ale complexilor sus menționați.

6. Diseminarea rezultatelor obținute în formă de publicații

1) Gao, S.; Rosales, H.D.; Gómez Albarracín, F.A.; **Tsurkan, V.**; Kaur, G.; Fennell, T.; Steffens, P.; Boehm, M.; Čermák, P.; Schneidewind, A.; Ressouche, E.; Cabra, D.C.; Rüegg, C.; Zaharko, O. Fractional antiferromagnetic skyrmion lattice induced by anisotropic couplings. *Nature*. 2020, 586, 37—41. Doi: [10.1038/s41586-020-2716-8](https://doi.org/10.1038/s41586-020-2716-8) (IF: 42,778).

2) Bachus, S.; Kaib, D.A.S.; Tokiwa, Y.; Jesche, A.; **Tsurkan, V.**; Loidl, A.; Winter, S.M.; Tsirlin, A.A.; Valentí, R.; Gegenwart, P. Thermodynamic Perspective on Field-Induced Behavior of $\alpha\text{-RuCl}_3$. *Phys Rev Lett*. 2020, **125(9)**, 097203-1—097203-7. Doi: [10.1103/PhysRevLett.125.097203](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.125.097203) (IF: 8,385).

3) Geirhos, K.; Gross, B.; Szigeti, B.G.; Mehlin, A.; Philipp, S.; White, J.S.; Cubitt, R.; Widmann, S.; Ghara, S.; Lunkenheimer, P.; **Tsurkan, V.**, Neuber, E., Ivaneyko, D.; Milde, P.; Eng, L.M.; Leonov, A.O.; Bordács, S.; Poggio, M.; Kézsmárki, I. Macroscopic manifestation of domain-wall magnetism and magnetoelectric effect in a Néel-type skyrmion host. *npj*

Quantum Materials. 2020, **5**, 47-1—47-8. Doi: [10.1038/s41535-020-0247-z](https://doi.org/10.1038/s41535-020-0247-z) (IF: 6,562).

4) **Croitori, D.; Filippova, I.**; Kravtsov, V.; Günther, A.; Widmann, S.; Reuter, D.; Krug von Nidda, H.-A.; Deisenhofer, J.; Loidl, A.; **Tsurkan, V.** Structure, superconductivity, and magnetism in $\text{Rb}_{1-x}\text{Fe}_{1.6}\text{Se}_{2-z}\text{S}_z$. *Phys Rev B*. 2020, **101(5)**, 054516-1—054516-18. Doi: [10.1103/PhysRevB.101.054516](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.101.054516) (IF: 3,736)

5) Miyata, A.; Suwa, H.; Nomura, T.; **Prodan, L.; Felea, V.**; Skourski, Y.; Deisenhofer, J.; Krug von Nidda, H.-A.; Portugall, O.; Zherlitsyn, S.; **Tsurkan, V.**; Wosnitza, J.; Loidl, A. Spin-lattice coupling in a ferrimagnetic spinel: Exotic H-T phase diagram of MnCr_2S_4 up to 110 T. *Phys Rev B*. 2020, **101(5)**, 054432-1—054432-8. Doi: [10.1103/PhysRevB.101.054432](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.101.054432) (IF: 3,736).

6) **Felea, V.**; Cong, P.T.; **Prodan, L.**; Gorbunov, D.I.; Nomura, T.; Skourski, Y.; Zherlitsyn, S.; Wosnitza, J.; Wang, Z.; Miyata, A.; Portugall, O.; Widmann, S.; Krug Von Nidda, H.-A.; Deisenhofer, J.; **Tsurkan, V.**; Loidl, A. High-field phase transitions in the orbitally ordered multiferroic GeV_4S_8 . *Phys Rev B*. 2020, **101(6)**, 064413-1—064413-10. Doi: [10.1103/PhysRevB.101.064413](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.101.064413) (IF: 3,736).

7) Reschke, S.; Tsirlin, A. A.; Khan, N.; **Prodan, L.; Tsurkan, V.**; Kézsmárki, I.; and Deisenhofer, J. Structure, phonons, and orbital degrees of freedom in $\text{Fe}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$, *PHYSICAL REVIEW B* **102**, 094307 (2020) DOI: [10.1103/PhysRevB.102.094307](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.102.094307) (IF: 3,736)

8) Sahasrabudhe, A.; Kaib, D.A.S.; Reschke, S.; German, R.; Koethe, T.C.; Buhot, J.; Kamenskyi, D.; Hickey, C.; Becker, P.; **Tsurkan, V.**; Loidl, A.; Do, S.H.; Choi, K.Y.; Grüninger, M.; Winter, S.M.; Wang, Zh.; Valentí, R.; van Loosdrecht, P.H.M. High-field quantum disordered state in $\alpha\text{-RuCl}_3$: Spin flips, bound states, and multiparticle continuum. *Phys Rev B*. 2020, **101(14)**, 140410-1—140410-6. Doi: [10.1103/PhysRevB.101.140410](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.101.140410) (IF: 3,736).

9) Wahl, P.; Singh, U.R.; **Tsurkan, V.**; Loidl, A. Nanoscale electronic inhomogeneity in $\text{FeSe}_{0.4}\text{Te}_{0.6}$ revealed through unsupervised machine learning. *Phys Rev B*. 2020, **101(11)**, 115112-1—115112-4. Doi: [10.1103/PhysRevB.101.115112](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.101.115112) (IF: 3,575).

10) Reschke, S.; Meggle, F.; Mayr, F.; **Tsurkan, V.; Prodan, L.**; Nakamura, H.; Deisenhofer, J.; Kuntscher, C.A.; Kézsmárki, I. Lattice dynamics and electronic excitations in a large family of lacunar spinels with a breathing pyrochlore lattice structure. *Phys Rev B*. 2021, **101(7)**, 075118-1—075118-11. Doi: [10.1103/PhysRevB.101.075118](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.101.075118) (IF: 3,736).

11) Strinic, A.; Reschke, S.; Vasin, K.V.; Schmidt, M.; Loidl, A.; **Tsurkan, V.**; Eremin, M.V.; Deisenhofer, J. Magnetoelectric properties and low-energy excitations of multiferroic FeCr_2S_4 . *Phys Rev B*. 2020, **102(13)**, 134409-1—134409-10. Doi: [10.1103/PhysRevB.102.134409](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.102.134409) (IF: 3,575)

12). Warzanowski, P.; Borgwardt, N.; Hopfer, K.; Attig, J.; Koethe, T.C.; Becker, P.; **Tsurkan, V.**; Loidl, A.; Hermanns, M.; Van Loosdrecht, P.H.M.; Grüninger, M. Multiple spin-orbit excitons and the electronic structure of $\alpha\text{-RuCl}_3$. *Phys Rev Res*. 2020, **2(4)**, 042007-1—042007-7. Doi: [10.1103/PhysRevResearch.2.042007](https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.2.042007)

13) Szaller, D.; Szász, K.; Bordács, S.; Viirok, J.; Rődöm, T.; Nagel, U.; Shuvaev, A.; Weymann, L.; Pimenov, A.; Tsirlin, A.A.; Jesche, A.; **Prodan, L.; Tsurkan, V.**; Kézsmárki, I. Magnetic anisotropy and exchange paths for octahedrally and tetrahedrally coordinated Mn^{2+} ions in the honeycomb multiferroic $\text{Mn}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$. *Phys Rev B*. 2020, **102(14)**, 144410-1—14441-8. Doi: [10.1103/PhysRevB.102.144410](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.102.144410) (IF: 3,575).

14) Kiiamov, A.; **Tsurkan, V.; Croitori, D.**; Krug von Nidda, H.-A.; Seidov, Z.; Wille, H.-Ch.; Sergueev, I.; Leupold, O.; Tayurskii, D.; Tagirov, L. Application of Nuclear Inelastic

Scattering Spectroscopy to the Frequency Scale Calibration of Ab Initio Calculated Phonon Density of States of Quasi-One-Dimensional Ternary Iron Chalcogenide RbFeSe₂. *Appl Sci - Basel*. 2020, **10(20)**, 7212-1—7212-8. Doi: [10.3390/app10207212](https://doi.org/10.3390/app10207212) (IF: 2,474).

15) Csizi, B.; Reschke, S.; Strinic, A.; **Prodan, L.**; **Tsurkan, V.**; Kézsmárki, I.; Deisenhofer, J. Magnetic and vibronic terahertz excitations in Zn-doped Fe₂Mo₃O₈. *Phys Rev B*. 2020, **102(17)**, 174407-1—174407-10. Doi: [10.1103/PhysRevB.102.174407](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.102.174407) (IF: 3,575).

16) Inosov, D. S.; Onykiienko, Y. O.; Tymoshenko, Y. V.; Akopyan, A.; Shukla, D.; Prasai, N.; Doerr, M.; Zherlitsyn, S.; Voneshen, D.; Boehm, M.; **Tsurkan, V.**; **Felea, V.**; Loidl, A.; and Cohn, J. L. Magnetic-field dependence of low-energy magnons, anisotropic heat conduction, and spontaneous relaxation of magnetic domains in the cubic helimagnet ZnCr₂Se₄, *Phys Rev B*. 2020, **102**, accepted for publication.

17) Avdizhiyan, A.Y.; Lavrov, S.D.; Abdullaev, D.A.; Shestakova, A.P.; **Kulyuk, L.L.**; Mishina, E.D. Tunable spectral properties of photodetectors based on quaternary transition metal dichalcogenide alloys Mo_xW_(1-x)Se_{2y}S_{2(1-y)}. *IEEE Sensors Journal*, Doi: [10.1109/JSEN.2020.3012876](https://doi.org/10.1109/JSEN.2020.3012876). (IF:3,780).

18) Nevinskas, I.; Norkus, R.; Geižutis, A.; **Kulyuk, L.**; **Miku, A.**; **Sushkevich K.**; and Krotkus, A. Terahertz pulse emission from photoexcited bulk crystals of transition metal dichalcogenides. *Journal of Physics D: Applied Physics*, Accepted Manuscript online 19 November 2020 • © 2020 IOP Publishing Ltd. (IF:2,890).

19) **Ostrovsky, S.M.**; **Klokishner, S.I.** Modeling of Electron Transfer in a Linear Trinuclear Fe–Co–Fe Complex: Magnetic and Polarizability Properties. *J Phys Chem A*. 2020, **124(8)**, 3618—3525. Doi: [10.1021/acs.jpca.0c01717](https://doi.org/10.1021/acs.jpca.0c01717) (IF: 2,641).

20) **Ostrovsky, S.**; Tomkowicz, Z.; Foroc, S.; Reedijk, J.; Haase, W. Magneto-optical study of the zero-field splitting in a mononuclear tetrahedrally coordinated Co(II) compound with a mixed ligand surrounding. *Polyhedron*. 2020, **187**, 114630. Doi: [10.1016/j.poly.2020.114630](https://doi.org/10.1016/j.poly.2020.114630) (IF: 2,284).

21) **Klokishner, S.**; **Ostrovsky, S.M.** Interplay of Jahn-Teller Ordering and Spin Crossover in Co(II) Compounds. *Magnetochemistry*, 2020, **6(4)**, 62-1—62-11. Doi: [10.3390/magnetochemistry6040062](https://doi.org/10.3390/magnetochemistry6040062) (IF: 1,947).

22) Gross, B.; Philipp, S.; Geirhos, K.; Mehlin, A.; Bordács, S.; **Tsurkan, V.**; Leonov, A.; Kézsmárki, I.; Poggio, M. Stability of Néel-type skyrmion lattice against oblique magnetic fields in GaV₄S₈ and GaV₄Se₈. *Phys Rev B*. 2020, **102(10)**, 104407-1—104407-9. Doi: [10.1103/PhysRevB.102.104407](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.102.104407) (IF: 3,575).

23) **Lascova-Baciu, R.** Hydrothermal and Electrochemical Synthesis of MoS₂ Nanoparticles and Characterization of the Latter. *Surf Eng Appl Elect*. 2020, **56(2)**, 127—132. Doi: [10.3103/S1068375520020118](https://doi.org/10.3103/S1068375520020118).

24) **Nazarov, M.** SrAl₂O₄:Eu²⁺,Dy³⁺: Synthesis, luminescence, properties, and application. *Moldavian Journal of the Physical Sciences*. 2020, **19(1-2)**, 59—88. Doi: [10.5281/zenodo.4118682](https://doi.org/10.5281/zenodo.4118682).

25) **Klokishner, S.I.**; **Reu, O.S.** Spin Crossover in Iron(II) Complexes with Mixed Nitrogen-Sulfur Coordination: DFT Modeling. In: *IFMBE Proceedings, V. 77, Springer, 2020*, p. 33—36. Doi: [10.1007/978-3-030-31866-6_7](https://doi.org/10.1007/978-3-030-31866-6_7).

26) **Ostrovsky, S.M.**; **Klokishner, S.I.** Modeling of Charge Transfer Induced Spin Transition in a Linear {FeCoFe} Complex. In: *IFMBE Proceedings, V. 77, Springer, 2020*, p. 43—46. Doi: [10.1007/978-3-030-31866-6_9](https://doi.org/10.1007/978-3-030-31866-6_9)

27) **Siminel, N.**; **Nedelea, V.**; **Sushkevich, K.**; **Siminel, A.**; **Micu, A.**; **Kulyuk, L.** Radiative

Recombination of Bound Excitons in MoSe₂:I₂ Layered Crystals. În *IFMBE Proceedings, V. 77, Springer, 2020*, p. 279-28. Doi: [10.1007/978-3-030-31866-6_55](https://doi.org/10.1007/978-3-030-31866-6_55)

28) **Roman, M.A.; Klokishner, S.I.** Modeling of the Valence Tautomeric Transformation in Heterometallic [Cr-Dhbq-Co] Molecules. În: *IFMBE Proceedings, V. 77, Springer, 2020*, p. 67—70. Doi: [10.1007/978-3-030-31866-6_14](https://doi.org/10.1007/978-3-030-31866-6_14)

29) Verlan, V.I.; Culeac, I.P.; Bordian, O.; Zubareva, V.E.; Bulhac, I.; Iovu, M.S.; Enachescu, M.; **Siminel, N.A.; Nedelea, V.V.** Luminescence Properties of a Novel Eu³⁺ Dinuclear Coordination Compound. În: *IFMBE Proceedings, V. 77, Springer, 2020*, p. 161—165. Doi: [10.1007/978-3-030-31866-6_33](https://doi.org/10.1007/978-3-030-31866-6_33).

30) **Siminel, N.; Nedelea, V.; Sushkevich, K.; Siminel, A.; Micu, A.; Kulyuk, L.** Radiative Recombination of Bound Excitons in MoSe₂:I₂ Layered Crystals. În: *IFMBE Proceedings, V. 77, Springer, 2020*, p. 279—283. Doi: [10.1007/978-3-030-31866-6_55](https://doi.org/10.1007/978-3-030-31866-6_55).

7. Diseminarea rezultatelor obținute în formă de prezentări (comunicări, postere, teze/rezume/abstracte) la foruri științifice

Toate conferințele au fost anulate.

8. Protecția rezultatelor obținute în formă de obiecte de proprietate intelectuală

9. Materializarea rezultatelor obținute

10. Dificultățile în realizarea proiectului

Reducerea cu 30% din finanțarea proiectului preconizată inițial și alocarea mijloacelor rămase, destinate procurării materialelor și a unor dispozitive/aparate elementare (dar indispensabile pentru îndeplinirea proiectului), doar spre finele anului, afectează rău fezabilitatea oricărui proiect. De fapt o astfel de abordare a finanțării sferei de cercetare-dezvoltare (R&D) pur și simplu discreditează procedura finanțării prin concurs, contribuind la degradarea instituțiilor de cercetare și, practic, la distrugerea viitorului cercetării științifice autentice în Republica Moldova.

11. Concluzii

S-au obținut monocristale perfecte ale compusului GeV_4S_8 cu structura spinel lacunară, în care cercetările magnetizării, ultrasunetului și polarizării dielectrice, efectuate în câmpuri magnetice puternice până la 60 T, au evidențiat o secvență de stări complexe magnetice, polare cu ordonarea orbitală diferită. În premieră a fost construită diagrama de fază H - T completă ale acestui compus, care manifestă proprietăți multiferroice importante pentru sisteme moderne de memorie magnetică.

Au fost obținute cristale lamelare de MoS_2 , MoSe_2 și WSe_2 dopate cu crom și vanadiu și intercalate cu clor ($\text{MoS}_2:\text{Cl}_2$) și iod ($\text{MoSe}_2:\text{I}_2$, $\text{WSe}_2:\text{I}_2$). În spectrele de fotoluminescență ale cristalelor dopate au fost depistate noi benzi largi în domeniul infraroșu, centrate la energii mai mici decât band-gapul indirect al materialului. Prin analiza comparativă a spectrelor de împrăștiere Raman, obținute la excitarea cu laser IR, și a spectrelor de luminescență a excitonilor legați în $\text{MoSe}_2:\text{I}_2$, au fost identificate liniile spectrale Raman, cauzate de moleculele de halogen încorporate în interstițiul van der Waals.

A fost propusă o nouă tratare microscopică pentru descrierea fenomenului crossover-ului de spin în compușii, în care ionul de fier(II) se află în înconjurarea octaedrică a ionilor de sulf. În cadrul acestei tratări a fost dată interpretarea calitativă și cantitativă a cursului transformării de spin în funcție de temperatură și explicate proprietățile magnetice observate experimental în compusul $[\text{Fe}^{\text{II}}(\text{EtL})_3](\text{PF}_6)_2$ și derivații acestuia.

English

The perfect single crystals of GeV_4S_8 with lacunar spinel structure have been grown. Magnetization, ultrasound and dielectric polarization investigations performed in high magnetic fields up to 60 T revealed a sequence of complex magnetic, polar, and orbitally ordered states. For the first time the complete H - T phase diagram was constructed for this compound, which manifests multiferroic properties important for novel magnetic memory systems.

Layered crystals of MoS_2 , MoSe_2 and WSe_2 doped with chromium and vanadium and intercalated with chlorine ($\text{MoS}_2:\text{Cl}_2$) and iodine ($\text{MoSe}_2:\text{I}_2$, $\text{WSe}_2:\text{I}_2$) were grown. In the PL spectra of doped crystals new infrared broad bands, centered at energies less than the indirect band gap of the material, were observed. By comparative analysis of Raman scattering spectra, obtained at IR laser excitation, and of the bound excitons luminescence spectra of $\text{MoSe}_2:\text{I}_2$ layered compound, the Raman spectral lines caused by halogen molecules embedded within the

van der Waals gap were identified.

A new microscopic approach for the description of the spin crossover phenomenon in compounds in which the Fe(II) ion is in octahedral sulfur surrounding is suggested. Within the framework of this approach the qualitative and quantitative interpretation of the course of spin transformation in the $[\text{Fe}^{\text{II}}(\text{EtL})_3](\text{PF}_6)_2$ compound and its derivatives is given, and the observed magnetic properties of these crystals are explained.

Conducătorul de proiect Culiuc / Culiuc Leonid /

Data: 27 noiembrie 2020

LS



Executarea devizului de cheltuieli, conform anexei nr. 2.3 din contractul de finanțare

Cifrul proiectului: 20.80009.5007.19

| Cheltuieli, mii lei | | | | | | |
|--|----------|---------|------------------|----------|----------|------|
| Denumirea | Cod | | Anul de gestiune | | | |
| | Eco (k6) | Aprobat | Modificat +/- | Precizat | Executat | Sold |
| Remunerarea muncii angajaților conform statelor | 211180 | | | | | |
| Contribuții de asigurări sociale de stat obligatorii | 212100 | | | | | |
| Prime de asigurare obligatorie de asistenta medicală achitate de angajator și angajați pe teritoriul țării | 212210 | | | | | |
| Deplasări în interes de serviciu peste hotare | 222720 | | | | | |
| Servicii de cercetări științifice | 222930 | | | | | |
| Servicii neatribuite altor aliniate | 222990 | | | | | |
| Procurarea materialelor de uz gospodăresc și rechizite de birou | 316110 | | | | | |
| Procurarea activelor nemateriale | 317110 | | | | | |
| Procurarea pieselor de schimb | 332110 | | | | | |
| Procurarea medicamentelor și materialelor sanitare | 334110 | | | | | |
| Procurarea materialelor de uz gospodăresc și rechizitelor de birou | 336110 | | | | | |
| Total | | | | | | |

Conducătorul organizației _____ / Macovei Mihai/

Contabil șef _____ / Mîndru Cecilia /

Conducătorul de proiect _____ / Culiuc Leonid/

Data: _____

LS

Componența echipei proiectului

Cifrul proiectului _____

| Echipea proiectului conform contractului de finanțare (la semnarea contractului) | | | | | | |
|--|---|------------------|------------------------------------|---|-------------------|--------------------|
| Nr | Nume, prenume (conform contractului de finanțare) | Anul nașterii | Titlul științific | Norma de muncă conform contractului | Data angajării | Data eliberării |
| 1. | Culiuc Leonid | 1950 | Cerc. șt. principal, dr.hab. | 1 | 01.01.2020 | |
| 2. | Clochișner Sofia | 1949 | Cerc. șt. principal, dr.hab. | 1 | 01.01.2020 | |
| 3. | Țurcan Vladimir | 1951 | Cerc. șt. principal, dr.hab. | 1 | 01.01.2020 | |
| 4. | Ostrovshii Serghei | 1968 | Cerc. șt. principal, dr.hab. | 1 | 01.01.2020 | |
| 5. | Filippova Irina | 1955 | Cerc. șt. coord., dr. | 1 | 01.01.2020 | |
| 6. | Kulikova Olga | 1952 | Cerc. șt. coord., dr. | 1 | 01.01.2020 | |
| 7. | Reu Oleg | 1976 | Cerc. șt. coord., dr. | 1 | 01.01.2020 | |
| 8. | Siminel Anatolii | 1956 | Cerc. șt. coord., dr. | 1 | 01.01.2020 | |
| 9. | Sușchevici Constantin | 1943 | Cerc. șt. coord., dr. | 0,5 | 01.01.2020 | |
| 10. | Nazarov Mihail | 1946 | Cerc. șt. coord., dr. | 0,5 | 01.01.2020 | |
| 11. | Croitori Dorina | 1990 | Cerc. șt. sup., dr. | 1 | 01.01.2020 | |
| 12. | Felea Viorel | 1980 | Cerc. șt. sup., dr. | 1 | 01.01.2020 | |
| 13. | Prodan Lilian | 1991 | Cerc. șt. sup., dr. | 1 | 01.01.2020 | |

| | | | | | | |
|-----|---------------------|------|------------------------|-----|------------|--|
| 14. | Roman Marianna | 1985 | Cerc. șt. Sup., dr. | 1 | 01.01.2020 | |
| 15. | Goremîchin Vladimir | 1952 | Cerc. șt. | 0,5 | 01.01.2020 | |
| 16. | Micu Alexandru | 1963 | Cerc. șt. | 1 | 01.01.2020 | |
| 17. | Pasenco Leonid | 1951 | Cerc. șt. | 0,5 | 01.01.2020 | |
| 18. | Siminel Nikita | 1987 | Cerc. șt. | 1 | 01.01.2020 | |
| 19. | Nedelea Vitalie | 1981 | Cerc. șt.stag. | 1 | 01.01.2020 | |

| | |
|---|------|
| Pondereea tinerilor (%) din numărul total al executorilor conform contractului de finanțare | 21,1 |
|---|------|

| Modificări în componența echipei pe parcursul anului 2020 | | | | | |
|---|-----------------------|---------------|------------------------------------|-------------------------------------|----------------|
| Nr | Nume, prenume | Anul nașterii | Titlul științific | Norma de muncă conform contractului | Data angajării |
| 1. | Culiuc Leonid | 1950 | Cerc. șt. principal, dr.hab. | 1 | |
| 2. | Clochișner Sofia | 1949 | Cerc. șt. principal, dr.hab. | 1 | |
| 3. | Țurcan Vladimir | 1951 | Cerc. șt. principal, dr.hab. | 1 | |
| 4. | Ostrovșchii Serghei | 1968 | Cerc. șt. principal, dr.hab. | 1 | |
| 5. | Filippova Irina | 1955 | Cerc. șt. coord., dr. | 1 | |
| 6. | Kulikova Olga | 1952 | Cerc. șt. coord., dr. | 1 | |
| 7. | Reu Oleg | 1976 | Cerc. șt. coord., dr. | 1 | |
| 8. | Siminel Anatolii | 1956 | Cerc. șt. coord., dr. | 1 | |
| 9. | Sușchevici Constantin | 1943 | Cerc. șt. coord., dr. | 0,5 | |

