

**RECEȚIONAT**

Agenția Națională pentru Cercetare  
și Dezvoltare \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_ 2024

**AVIZAT**

Secția AȘM \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_ 2024

**RAPORT ȘTIINȚIFIC ANUAL**  
**pentru etapa 2023**  
**privind implementarea proiectului din cadrul**  
**Programului de Stat (2020–2023)**

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

Cifrul proiectului **20.80009.5007.19**

Prioritatea Strategică: Competitivitate economică și tehnologii inovative

Rectorul organizației

ȘAROV Igor

Consiliul științific al IFA

ȘIKIMAKA Olga

Conducătorul proiectului

CULIUC Leonid



Chișinău 2024

## CUPRINS:

1. Scopul etapei 2023 conform proiectului depus la concurs
2. Obiectivele etapei 2023
3. Acțiunile planificate pentru realizarea scopului și obiectivelor etapei 2023
4. Acțiunile realizate
5. Rezultatele obținute
6. Impactul științific, social și/sau economic al rezultatelor științifice obținute în cadrul proiectului
7. Colaborare la nivel național și internațional în cadrul implementării proiectului
8. Dificultățile în realizarea proiectului
9. Diseminarea rezultatelor obținute în proiect în formă de publicații
10. Diseminarea rezultatelor obținute în proiect în formă de prezentări la foruri științifice.
11. Promovarea rezultatelor cercetărilor obținute în proiect în mass-media.
12. Teze de doctorat / postdoctorat susținute și confirmate în anul 2023 de membrii echipei proiectului
13. Concluzii
14. Anexa nr. 1. Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în proiect 2023
15. Anexa nr. 2. Lista lucrărilor științifice, științifico-metodice și didactice publicate în anul 2023 în cadrul proiectului din Programul de Stat.
16. Anexa nr. 3. Executarea devizului de cheltuieli.
17. Anexa nr. 4. Componenta echipei proiectului pentru anul 2023.

## 1. Scopul etapei 2023 conform proiectului depus la concurs

- 1.1. Optimizarea parametrilor tehnici ai compușilor  $AB_4X_8$  și  $Me_2Mo_3O_8$ . Elaborarea tehnologiei de obținere a monocristalelor perfecte ale compușilor cu structura spinel lacunară de tip  $AB_4X_8$  și ale compușilor multiferoici de tip  $Me_2Mo_3O_8$  cu structura hexagonală cu proprietăți magnetice și electronice variabile.
- 1.2. Obținerea heterostructurilor van der Waals și cercetarea proprietăților lor optice.
- 1.3. Studiul tranziției de spin în compusul  $[Co_2Fe_2(bpy^*)_4(CN)_6(tp^*)_2](PF_6)_2 \cdot 2CP \cdot 8BN$ .

## 2. Obiectivele etapei 2023

- 2.1. Optimizarea parametrilor magnetici și electrici ale compușilor cu structura spinel lacunară de tip  $AB_4X_8$  și compușilor hexagonali de tip  $Me_2Mo_3O_8$  prin tratamente termice, dopare și substituții cationice și anionice.
- 2.2. Elaborarea succesiunii de procedee tehnologice pentru fabricarea heterostructurilor de tip van der Waals prin stivuirea monostraturilor atomare de  $TX_2$  cu compoziție diferită, luându-se în considerare și orientarea cristalină reciprocă a acestor straturi. Efectuarea caracterizărilor structurale prin metodele spectroscopiei optice, microscopiei optice și AFM. Analiza rezultatelor caracterizării cu *feedback* la condițiile tehnologice de obținere și interpretarea proprietăților depistate.
- 2.3. Elaborarea modelului pentru descrierea tranzițiilor de spin în compusul  $[Co_2Fe_2(bpy^*)_4(CN)_6(tp^*)_2](PF_6)_2 \cdot 2CP \cdot 8BN$ .

## 3. Acțiunile planificate pentru realizarea scopului și obiectivelor etapei 2023

- 3.1. Elaborarea procedeelelor tehnologice de modificare și optimizare a parametrilor magnetici și electrici ale compușilor  $AB_4X_8$  cu structura spinel lacunară și compușilor  $Me_2Mo_3O_8$  cu structura hexagonală.
- 3.2. Obținerea heterostructurilor van der Waals din monostraturi de  $TX_2$  cu compoziție diferită, asamblate prin stivuirea mecanică a nanofoliilor, sau prin metoda CVD. Vor fi obținute noi date experimentale privind proprietățile optice, fotoelectrice și electrofizice ale heterostructurilor obținute și studiate procesele electronice, ce determină manifestarea acestor proprietăți.
- 3.3. Calculul DFT al energiilor într-un singur punct pentru diferite valori ale spinului complexului  $[Co_2Fe_2(bpy^*)_4(CN)_6(tp^*)_2](PF_6)_2 \cdot 2CP \cdot 8BN$  și diferite temperaturi. Elucidarea cursului transformării hexagonală prin dopare și substituție. Prin dopare a compusului lacunar  $GaV_4S_4$  cu ionii de Ge a fost schimbată semnificativ valoarea conductibilității ceea ce permite de a determina mecanismele de transport al sarcinii.

#### 4. Acțiunile realizate

- 4.1. Prin doparea compusului lacunar  $\text{GaV}_4\text{S}_4$  cu ionii de Ge a fost schimbată semnificativ valoarea conductibilității ceea ce permite de a determina mecanismele de transport al sarcinii. S-a demonstrat că substituția ionilor de Fe cu Zn modifică starea de bază magnetică a compusului hexagonal  $\text{Fe}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$  ceea ce oferă posibilitate de a dirija proprietățile multiferoice ale acestui compus.
- 4.2. În vederea obținerii heterostructurilor van der Waals prin metoda depunerii chimice din fază de vapori CVD au fost crescute straturi ultrasubțiri de  $\text{MoS}_2$  pe suprafața monocristalelor de  $\text{MoSe}_2$ , precum și straturi de  $\text{WS}_2$  pe cristale de  $\text{WSe}_2$ . În același scop au fost efectuate tentative de a stivui mecanic nanofolii/straturi de  $\text{MoSe}_2$  cu cele de  $\text{WSe}_2$  și cercetate proprietățile luminescente ale acestor structuri planare. A fost demonstrat, că urmare a stabilității insuficiente a fluxului de gaz transportor (argon) compoziția structurilor obținute era neomogenă manifestând devieri considerabile de la compoziția stoichiometrică. Au fost stabilite regimurile tehnologice optime pentru activarea eficientă a cristalelor de DMT cu molecule de halogen (iod și brom).
- 4.3. A fost reprodus cursul tranziției de spin induse de transferul de sarcină demonstrat de complexul tetranuclear cu punțile de cianură  $[\text{Co}_2\text{Fe}_2(\text{bpy}^*)_4(\text{CN})_6(\text{tp}^*)_2](\text{PF}_6)_2 \cdot 2\text{CP} \cdot 8\text{BN}$  prin calculele DFT ale energiilor într-un singur punct (energiilor unui sistem multielectronic sub acțiunea potențialului creat de aranjarea dată de atomi) pentru diferite valori ale spinului total al complexului într-un interval larg de temperaturide spin în acest compus în funcție de temperatură.

#### 5. Rezultatele obținute

Au fost elaborate procedeele de dirijare a proprietăților magnetice și electrice ale compușilor cu structura spinel lacunară de tip  $\text{GaV}_4\text{S}_4$  și compușilor multiferoice de tip  $\text{Fe}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$  cu structura hexagonală prin dopare și substituții cationice. Au fost elaborate regimurile tehnologice de sintetizare în starea solidă și creștere a monocristalelor prin reacțiile chimice de transport a compușilor  $\text{GaV}_4\text{S}_8$  (Ge) și  $\text{Fe}_{2-x}\text{Zn}_x\text{Mo}_3\text{O}_8$ .

Au fost crescute monocristalele perfecte ale compusului  $\text{GaV}_4\text{S}_8$  dopate cu germaniu. S-a stabilit că doparea a permis de a mări substanțial (până la 4 ordine !) valoarea conductibilității electrice a acestui material. Aceasta permite de a efectua măsurătorile efectului Hall și a determina mecanismele de transport al sarcinii în cristalele  $\text{GaV}_4\text{S}_8$ , care sunt importante pentru clarificarea originii stărilor magnetice de tip *skyrmioni* de dimensiunea nanometrică.

Au fost crescute monocristalele perfecte ale compusului multiferoic  $\text{Fe}_{2-x}\text{Zn}_x\text{Mo}_3\text{O}_8$  cu substituția ionilor de Fe cu Zn. Omogenitatea cristalelor obținute a fost verificată prin difracția razelor X. Analiza datelor structurale a permis de a determina simetria structurii cristaline precum și pozițiile atomilor în celula cristalină a acestui material. Au fost identificat grupul de simetrie  $P6_3mc$  și determinați parametrii rețelei cristaline  $a = b = 5.779(1) \text{ \AA}$  și  $c = 10.0314(1) \text{ \AA}$ . S-a stabilit că ionii de Zn substituie ionii de Fe preponderent în pozițiile octaedrice. În acelaș timp, aceasta

substituție schimbă starea magnetică de bază de la antiferomagnetică pentru compusul pur  $\text{Fe}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$  la ferimagnetică pentru compusul  $\text{Fe}_{2-x}\text{Zn}_x\text{Mo}_3\text{O}_8$  (cu  $x=0.14$ ). Cercetările proprietăților magnetice efectuate cu ajutorul magnetometriei SQUID au evidențiat că tranziția în starea cu ordonare ferimagnetică are loc prin starea intermediară antiferomagnetică. Acest fapt se manifestă prin două anomalii în dependența de temperatură a susceptibilității magnetice (Fig. 1).

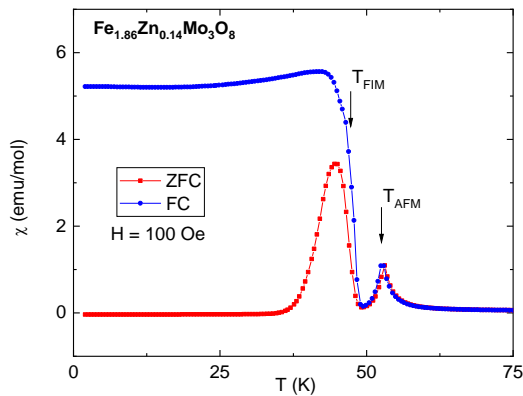


Fig. 1. Susceptibilitatea magnetică în funcție de temperatură pentru compusul  $\text{Fe}_{2-x}\text{Zn}_x\text{Mo}_3\text{O}_8$  (cu  $x=0.14$ ).

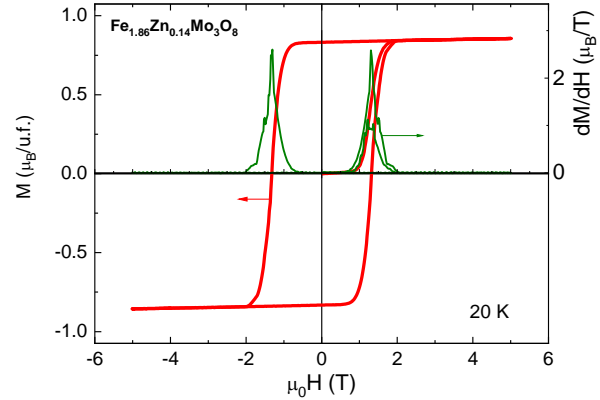


Fig. 2. Curba de magnetizare pentru compusul  $\text{Fe}_{2-x}\text{Zn}_x\text{Mo}_3\text{O}_8$  (cu  $x=0.14$ ) (axa stângă). Derivata magnetizării în funcție de câmp magnetic aplicat (axa dreaptă).

În monocristalele cu substituția  $x=0.14$  a fost evidențiat un fenomen nou de magnetizare reversibilă care are loc prin intermediul stării antiferomagnetice. Acest mecmism a fost confirmat prin cercetările polarizării dielectrice, care manifestă piscuri acute la câmpul coercitiv, similare cu cele ale derivatei magnetizării  $dM/dH$  (Fig. 2). Studiile complimentare spectroscopice în regiunea THz au evidențiat reapariția modei magnonice care este prezentă numai în starea antiferomagnetică. S-a presupus că fenomenul observat este determinat de cuplajul dintre straturile honeycomb, anizotropia puternică de tip planul ușor și fluctuațiile de spin, care rezultă în interacțiunea complexă dintre fazele ferrimagnetice și antiferomagnetice.

Raportul științific pentru anul 2022 conține descrierea detaliată a instalației și procedeele tehnologice de depunere chimică din fază de vapori (metoda CVD) a straturilor de  $\text{Mo(W)S}_2$  pe substraturi de  $\text{SiO}_2/\text{Si}$  ( $\text{SiO}_2$  grosime, 300 nm) la presiunea atmosferică, folosind în calitate de precursori oxizii  $\text{Mo(W)O}_3$  de înaltă puritate și pulberea de sulf, iar în calitate de gaz transportor – argonul. Această instalație a fost utilizată și pentru obținerea heterostructurilor de tip van der Waals, adică pentru depunerea straturilor ultrasubțiri de  $\text{MoS}_2$  pe suprafața monocristalelor lamelare de  $\text{MoSe}_2$ , precum și straturilor de  $\text{WS}_2$  pe cristalele de  $\text{WSe}_2$ . Tentativele de a realiza aceste depuneri s-au soldat cu rezultate mai curând negative. Structurile obținute erau neomogene la compoziție cu deviere importantă de la stoichiometrie. Pentru depășirea acestor probleme era necesar de a modifica instalația tehnologică prin includerea unei intrări auxiliare în reactorul de cuarț, prin care să fie transportați vaporii metalului de tranziție cu o viteză diferită (de câteva ori mai înaltă) decât cea a calcogenului. Reglarea vitezei acestui flux de gaze necesită folosirea unui al doilea controler de debit de masă (Mass Flow Controller) digital achiziția căruia, preconizată pentru începutul anului 2023, a fost realizată doar în a doua jumătate a lunii decembrie.

Concomitent au fost identificate condițiile tehnologice optime de obținere a monocristalelor de dicalcogenizi ai metalelor de tranziție DMT (dimensiunea fiolelor, temperaturile și durata procesului de creștere, regimul de răcire al fiolelor, cantitatea halogenului utilizat ș.a.), care asigură concentrația maximală a moleculelor de halogen încorporate în rețeaua cristalină lamelară a DMT. La acest subiect au fost pregătite/depuse două propuneri de brevet.

La fel au fost finalizate cercetările structurii fononice ale spectrelor de luminescență a excitonilor legați în cristalele de MoSe<sub>2</sub> intercalate cu molecule de I<sub>2</sub>. Din dependența raportului intensităților liniilor spectrale pur excitonice A și B (zero phonon lines ZPL) a fost stabilit, că rata recombinării radiative a stării excitonice B cu lungimea de undă mai scurtă ( $E_B = 1.0416$  eV) este de 76 ori mai mare decât rata recombinării stării A ( $E_A = 1.0360$  eV). În baza analizei comparative a structurii spectrelor de luminescență la diferite temperaturi și a spectrelor Raman, măsurate la două lungimi de undă a luminii excitatoare a fost demonstrat, că cele 9 picuri ale benzii fononice (Fig.3) sunt formate doar de 2 moduri vibraționale cu frecvențele  $\nu_{ph1} = 144$  cm<sup>-1</sup> și  $\nu_{ph2} = 190$  cm<sup>-1</sup>. Prima frecvență corespunde modului vibrațional datorat unui proces Raman de ordinul doi, a doua aparține modului vibrațional local indus de molecula de iod, încorporată în structura stratificată a cristalului. Au fost examinate posibilitățile fundamentale de modificare a proprietăților electronice ale heterojuncțiunilor van der Waals prin intercalarea moleculelor de halogen în interfața joncțiunii.

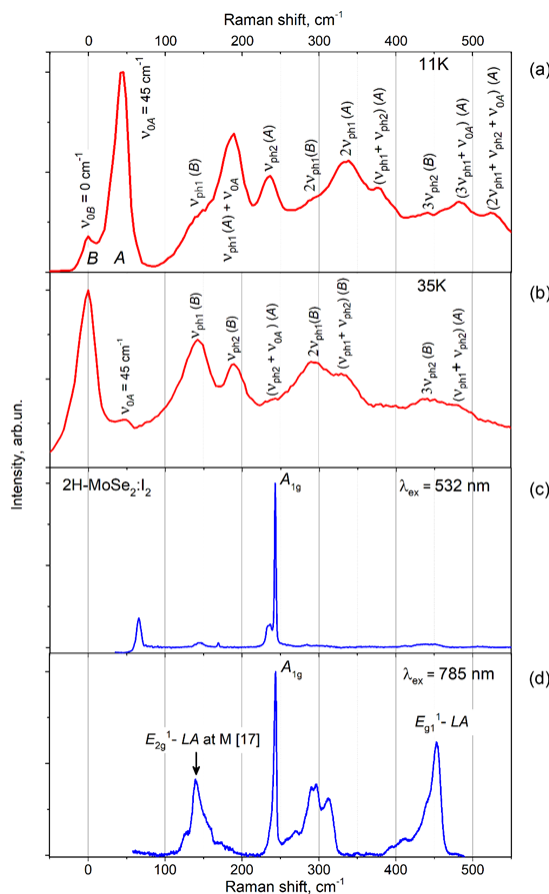


Fig. 3. Spectrele de fotoluminescență la temperaturile de 11 K (a) și 35 K (b) și spectrele Raman la temperatura ambiantă și două lungimi de undă excitatoare 532 nm (c) și 785 nm (d) ale monocristalelor MoSe<sub>2</sub>:I<sub>2</sub>. Pe figurile (a) și (b), de rând cu frecvențele, care identifică picurile replicilor fononice, în paranteze sunt indicate liniile pur excitonice (ZPLs), de la care aceste replici provin.

Pe baza calculelor DFT ale energiilor într-un singur punct (energiilor unui sistem multielectronic sub acțiunea potențialului creat de aranjarea dată de atomi) a fost examinat cursul transformării de spin în cristalul care conține clusterii tetranucleari  $[\text{Co}_2\text{Fe}_2(\text{bpy}^*)_4(\text{CN})_6(\text{tp}^*)_2](\text{PF}_6)_2 \cdot 2\text{CP} \cdot 8\text{BN}$  ( $\text{Co}_2\text{Fe}_2$ ). Calculele au fost efectuate cu ajutorul pachetului ORCA 4.2.1, funcționalei B3LYP, corecției de dispersie Grimme, setului de bază def2-TZVP de calitate triple-zeta împreună cu seturile de bază auxiliare def2/J și def2-TZVP/C. Energiile într-un singur punct au fost calculate pentru valorile  $S=0,1,2,3,4$  ale spinului total al complexului  $\text{Co}_2\text{Fe}_2$  la temperaturi  $T=100\text{K}$ ,  $200\text{K}$ ,  $260\text{K}$  și  $320\text{K}$  cu ajutorul datelor structurale corespunzătoare observate și au oferit dependența de temperatură a spinului stării fundamentale a complexului și, prin urmare, au dat posibilitatea de a descrie evoluția tranziției de spin în toți clusterii în cristal cu creșterea temperaturii. Din calculele DFT rezultă (Fig.4a) că la  $100\text{K}$  clusterii de tip A și B, prezenți în structură conform datelor structurale observate, sunt în starea cu spin mic (ls), cu valoarea spinului total  $S=0$ , adică conțin numai ioni diamagnetici  $\text{ls-Co}^{\text{III}}$  și  $\text{ls-Fe}^{\text{II}}$ , ceea ce este confirmat de valoarea observată a produsului  $\chi \cdot T$  care este nul la această temperatură. Rezultatele, prezentate în Fig.1a, arată evident că diferența dintre energiile într-un singur punct care corespund valorii maxime a spinului total  $S=4$  și cei minime  $S=0$  este mult mai mare pentru clusterii de tip B, ceea ce evidențiază tranziția ls-hs (hs – stare cu spin mare) la temperatură mai ridicată pentru ultimii clusteri în comparație cu cea pentru clusterii de tip A, ceea ce este în conformitate cu datele observabile structurale și cele asupra susceptibilității magnetice (Nihei, M.; Yanai, Y. Hsu, I.-Jui; Sekine, Y.; Oshio H. *Angew. Chem. Int. Ed.* 2017, 56, 591-594). Energiile într-un singur punct calculate la  $200\text{K}$  (Fig.1b) confirmă tranziția completă de spin a clusterelor de tip A, starea fundamentală a cărora posedă spinul  $S=4$ .

În același timp, calculele efectuate arată, că clusterii de tip A', care au apărut cu creșterea temperaturii, și clusterii de tip B rămân în stare diamagnetică. Acest rezultat este, de asemenea, în acord cu datele experimentale privind produsul  $\chi \cdot T$  la  $200\text{K}$ . De fapt, la  $200\text{K}$  partea clusterilor A reprezintă  $1/4$  din numărul total al clusterilor în cristal, contribuția clusterelor A la produsul ( $\chi \cdot T$ ) pentru valoarea  $S=4$  (amestecul paramagnetic al doi ioni de cobalt și doi ioni de fier cu valorile spinilor  $S_{\text{ls-Fe}^{3+}} = \frac{1}{2}$ ,  $S_{\text{hs-Co}^{2+}} = \frac{3}{2}$ ) și factorii g tipici 2,5 și 2,3 pentru ionii  $\text{hs-Co}^{\text{II}}$  și  $\text{ls-Fe}^{\text{III}}$  cu momentele unghiulare orbitale aproape stinse, este aproximativ egală cu  $1,71 \text{ emu} \cdot \text{mol}^{-1}\text{K}$  ceea ce la  $T=200\text{K}$  este foarte apropiată de valoarea  $\chi \cdot T=1,87 \text{ emu} \cdot \text{mol}^{-1}\text{K}$  observată, care se află între valorile din ramurile de răcire și încălzire. Încă o trăsătură poate fi observată în Fig.4b și anume, diferența energiilor într-un singur punct pentru stările cu valorile de spin  $S=4$  și  $0$  este mai mică pentru clusterii de tip A' decât pentru cei de tip B la  $200\text{K}$ , indicând astfel tranziția ls-hs la temperatura mai înaltă pentru clusterii B. La  $260\text{K}$  (Fig.4c) nu mai există nici o diferență între cele două subrețele A și A', structura cristalină este compusă din două tipuri de clusteri și anume din clusterii de tip A și B cu numărul de clusteri de fiecare tip egal cu  $1/2$  din numărul total de clusteri în cristal. În cele din urmă, la  $320\text{K}$  (Fig.4d) se schimbă doar starea fundamentală a clusterelor de tip B, care toți trec din starea ls în starea hs, în timp ce clusterii de tip A rămân în starea hs, deja populată la temperaturi mai joase (Fig.4c). Astfel rezultă, că la  $320\text{K}$  valoarea ( $\chi \cdot T$ ) calculată este de  $6,85 \text{ emu} \cdot \text{mol}^{-1}\text{K}$ , ceea ce este în acord cu datele experimentale.

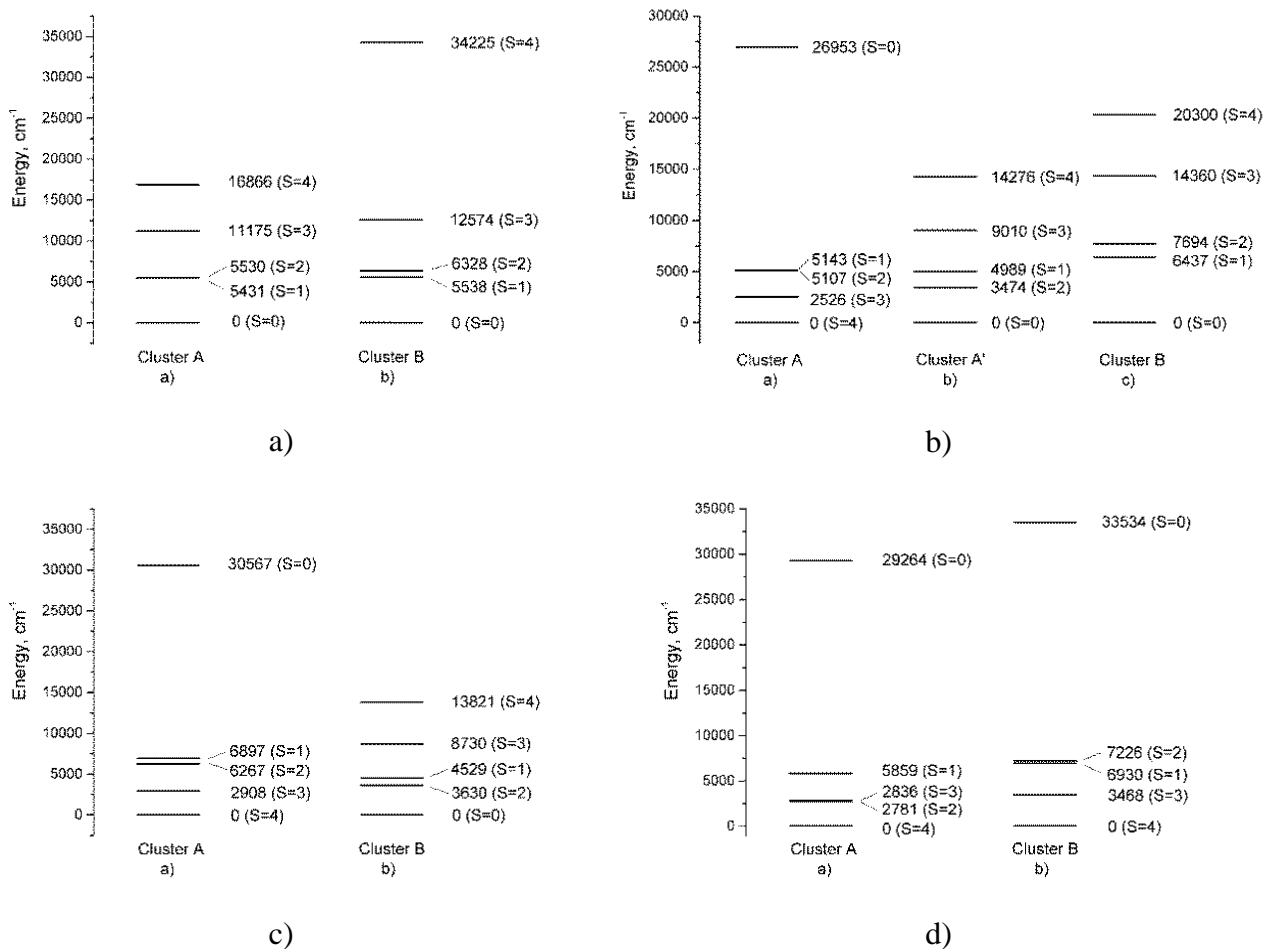


Fig. 4. Energiile într-un singur punct calculate prin metoda DFT, corespunzătoare diferitor valori ale spinului total  $S$  al clusterilor tetranucleari de tip A, A' și B în compusul  $[\text{Co}_2\text{Fe}_2(\text{bpy}^*)_4(\text{CN})_6(\text{tp}^*)_2](\text{PF}_6)_2 \cdot 2\text{CP} \cdot 8\text{BN}$  la temperaturile 100(a), 200(b), 260(c) și 320K(d).

## 6. Impactul științific, social și/sau economic al rezultatelor științifice obținute în cadrul proiectului

Rezultatele experimentale obținute în cadrul proiectului au permis de a clarifica mecanismele de apariție a stărilor de tip skyrmion, de ordonare polară și a proprietăților multiferoice ale compușilor  $AB_4X_8$  cu structura spinel lacunară și compușilor  $Me_2\text{Mo}_3\text{O}_8$  cu structura hexagonală. Aceste rezultate sunt importante atât pentru descrierea teoretică a fenomenelor fizice în materiale semiconductoare și izolatoare cu ordonare magnetică, cât și pentru elaborarea dispozitivelor spintronice bazate pe principii noi, cu capacitatea sporită de înregistrare a informației. Fenomenul de remagnetizare prin starea antiferomagnetică deschide o cale principial nouă de a dirija proprietățile magnetice și polarizarea dielectrică ale dispozitivelor spintronice la nivelul atomic.

Materialele semiconductoare stratificate de dicalcogenizi ai metalelor de tranziție sintetizate în cadrul proiectului dat în formă de cristale și straturi ultrasubțiri, precum și rezultatele originale ale cercetării fundamentale efectuate, sunt actuale atât din punctul de vedere al dezvoltării științei materialelor bidimensionale, cât și pentru înțelegerea și descrierea proceselor excitonice, ce determină importanța aplicativă a acestor nanomateriale pentru electronica și fotonica modernă,



inclusiv pentru elaborarea heterojoncțiunilor de tip van der Waals. De menționat, că actualmente acest tip de materiale și nanostructuri 2D stau la baza unei abordări tehnologice principial noi în proiectarea și fabricarea dispozitivelor semiconductoare multifuncționale.

Ținând cont de tendința modernă de a prezice noi materiale magnetice cu proprietăți avansate pe baza modelării computaționale, determinarea în rezultatul acestor calcule a valorilor spinului pentru stările inferioare ale sistemului în intervalul larg de temperaturi prin metoda DFT sau alte metode *ab initio* va da posibilitatea de a obține un răspuns preliminar dacă materialul supus examinării poate manifesta transformarea spinului sub acțiunea stimulilor externi și va oferi informația în ce interval de temperaturi se așteaptă să fie observate aceste tranziții.

## **7. Colaborare la nivel național și internațional în cadrul implementării proiectului**

- Colaborare cu Centrul de Corelații Electronice și Magnetism al Universității din Augsburg, Germania,
- II. Physikalisches Institut, Universität zu Köln, Germania
- Experimentelle Physik 2, Technische Universität Dortmund, Germania.
- Laboratorul de Câmpuri puternice ale Centrului Helmholtz, Dresden-Rossendorf, Germania.
- Fritz Haber Institute, Max Planck Society, Berlin, Germany.
- Paul Scherrer Institute, Villigen, Elveția.
- University of Bern, Bern, Switzerland.
- Centre de Recherche Paul Pascal CNRS , Université de Bordeaux, France.

## **8. Dificultățile în realizarea proiectului (financiare, organizatorice, legate de resursele umane etc.)**

Lipsa unui supercomputer performant pentru calculele DFT ale proprietăților magnetice și spectrelor optice ale moleculelor cu număr mare de atomi și solidelor împiedică studiul acestor sisteme.

Lipsa accesului la sistemul internațional Web of Science de asemenea nu permite cercetătorilor de a fi la curent cu rezultatele științifice de ultima oră din domeniu.

Funcționarea mult prea înceată / ineficientă a serviciilor, care asigură achiziționarea materialelor și echipamentului necesar pentru cercetarea experimentală.

## 9. Diseminarea rezultatelor obținute în proiect în formă de publicații

1. **REU, O.; OSTROVSKY, S.; KLOKISHNER, S.** Modeling of the Charge-Transfer-Induced Spin Transition in the Tetranuclear Cyanide-Bridged [Co<sub>2</sub>Fe<sub>2</sub>] Complex. În: *J Phys Chem A*. 2023, **127(36)**, 7496—7500. Doi: [10.1021/acs.jpca.3c03874](https://doi.org/10.1021/acs.jpca.3c03874) (IF: 2,9).
2. GHARA, S.; VASIN, K.; KAMENSKYI, D.; PRODAN, L.; **TSURKAN, V.**; KÉZSMÁRKI, I.; DEISENHOFER, J. Magnetization reversal through an antiferromagnetic state. În: *Nat Commun*. 2023, **14**, 5174-1—5174-8. Doi: [10.1038/s41467-023-40722-y](https://doi.org/10.1038/s41467-023-40722-y) (IF: 16,6).
3. SUSHKEVICH, K.; **SIMINEL, N.**; SIRKELI, V.; NEDEOGLO, N.; **SIMINEL, A.**; VATAVU, S.; GHILEȚCHII, GH.; IURIEVA, T.; **KULYUK, L.**; NEDEOGLO, D. Luminescent properties of ZnSe crystals doped with group V elements and iodine. În: *Physica B*. 2023, **666**, 415137. Doi: [10.1016/j.physb.2023.415137](https://doi.org/10.1016/j.physb.2023.415137) (IF: 2,8).
4. BREITNER, F.A.; JESCHE, A.; **TSURKAN, V.**; GEGENWART, PH. Thermal decomposition of the Kitaev material  $\alpha$ -RuCl<sub>3</sub> and its influence on low-temperature behavior. În: *Phys Rev B*. 2023, **108(4)**, 0456103. Doi: [10.1103/PhysRevB.108.045103](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.108.045103) (IF: 3,908).
5. **PRODAN, L.**; EVANS, D.M.; GRIFFIN, S.M.; OSTLIN, A.; ALTHALER, M.; LYSNE, E.; **FILIPPOVA, I.G.**; SHOVA, S.; CHIONCEL, L.; **TSURKAN, V.**; KEZSMARKI, I. Large ordered moment with strong easy-plane anisotropy and vortex-domain pattern in the kagome ferromagnet Fe<sub>3</sub>Sn. În: *Appl Phys Lett*. 2023, **123(2)**, 021901-1—021901-6. Doi: [10.1063/5.0155295](https://doi.org/10.1063/5.0155295) (IF: 4).
6. TOTH, B.; AMELIN, K.; ROOT, T.; NAGEL, U.; BAUERNFEIND, A.; **TSURKAN, V.**; **PRODAN, L.**; KRUG VON NIDDA, H.-A., SCHEFFLER, M.; KEZSMARKI, I.; BORDACS, S. Broadband magnetic resonance spectroscopy in MnSc<sub>2</sub>S<sub>4</sub>. În: *Sci Rep*. 2023, **13**, 11069-1—11069-7. Doi: [10.1038/s41598-023-37911-6](https://doi.org/10.1038/s41598-023-37911-6) (IF: 4,996).
7. **SIMINEL, N.**; SUSHKEVICH, K.; AAZOU, S.; MICU, A.; **SIMINEL, A.**; SEKKAT, Z.; **KULYUK, L.** Bound exciton luminescence and phonon sideband analysis of iodine intercalated bulk 2H-MoSe<sub>2</sub> crystals. În: *Opt Mater Express*. 2023, **13(4)**, 886—891. Doi: [10.1364/OME.482929](https://doi.org/10.1364/OME.482929) (IF: 3,074).
8. **PAVLENKO, V.**; BELOUSSOV, I. Amplified spontaneous emission from CdSe/CdS/CdZnS quantum dot films. În: *J Lumin*. 2023, **257**, 119643. Doi: [10.1016/j.jlumin.2022.119643](https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2022.119643) (IF: 4,171).
9. PLOKHIKH, I., FABELO, O.; **PRODAN, L.**; WÖRLE, M.; POMJAKUSHINA, E.; CERVELLINO, A.; **TSURKAN, V.**; KÉZSMÁRKI, I.; ZAHARKO, O. Magnetic and crystal structure of the antiferromagnetic skyrmion candidate GdSb<sub>0.71</sub>Te<sub>1.22</sub>. În: *J Alloy Compd*. 2023, **936**, 168348-1—168348-6 Doi: [10.1016/j.jallcom.2022.168348](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2022.168348) (IF: 6,371).
10. **NAZAROV, M.**; SPASSKY, D.; BRIC, M.G.; TSUKERBLAT, B. About the nature of luminescent bands in undoped and Eu<sup>2+</sup> doped SrAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub> phosphors. În: *Opt Mater*. 2023, **145**, 114377. Doi: [10.1016/j.optmat.2023.114377](https://doi.org/10.1016/j.optmat.2023.114377) (IF: 3,9).
11. **NAZAROV, M.** Combustion Synthesis of SrAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>:Eu<sup>2+</sup> Phosphor. Photoluminescence and Cathodoluminescence at Low Temperatures. În: *Surf Eng Appl Elect*. 2023, **59(4)**, 542—548. Doi: [10.3103/S1068375523040117](https://doi.org/10.3103/S1068375523040117).
12. **PRODAN, L.**; HEMMIDA, M.; KRUG VON NIDDA, H.-A.; CHIONCEL, L.; **TSURKAN, V.**; KÉZSMARKI, I.; Magnetocrystalline Anisotropy in Ferromagnetic Fe-Sn Kagome Magnets. În: *The Joint European Magnetic Symposia (JEMS) 27<sup>th</sup> August to 1<sup>st</sup> September 2023 Spaine, Madrid, Book of Abstracts*, p.390.
13. DOERR, M. DEEB, M. GRUMBACH J., ROTTER M., **TSURKAN V.**, A. MIYATA, S. ZHERLITSYN, J. Wosnitza Magnetoelastic Properties of MnSc<sub>2</sub>S<sub>4</sub>. În: *The Joint European*

*Magnetic Symposia (JEMS)* 27<sup>th</sup> August to 1<sup>st</sup> September 2023 Spaine, Madrid, Book of Abstracts, p.392.

14. **PRODAN, L., FELEA, V., SKOURSKII, Y., ZHERLITSYN, S., WOSNITZA, J., TSIRLIN, A., TSURKAN, V., KEZSMARKI, I.** Coexistence of antiferromagnetism and ferrimagnetism in adjacent honeycomb layers. În: *Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft*. 2023, **3**. p. 406. ISSN: 2751-0522
15. **PRODAN, L., FILIPPOVA, I., TSIRLIN, A., TSURKAN, V., KEZSMARKI, I.** Dilution of polar antiferromagnet Co<sub>2</sub>Mo<sub>3</sub>O<sub>8</sub>. În: *Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft*. 2023, **3**. p. 421. ISSN: 2751-0522.
16. **SZALLER, D., PRODAN, L., KORBINIAN, G., FELEA, V., SKOURSKI Y., GORBUNOV, D., FORSTER, T., HELM, T., NOMURA, T., MIYATA, A., ZHERLITSYN, S., WOSNITZA, J., TSIRLIN, A., TSURKAN, V., KEZSMARKI, I.** Coexistence of antiferromagnetism and ferrimagnetism in adjacent honeycomb layers. În: *Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft*. 2023, **3**. p. 452. ISSN: 2751-0522.
17. **GURBUZ, H.N.; IPEKCI, H.H.; GOREMICHIN, V.; SIMINEL, N.; KULYUK, L.; UZUNOGLU, A.** Home 6<sup>th</sup> International Conference on Nanotechnologies and Biomedical Engineering Technological Features of Creating Hole Structures on the Base of MoS<sub>2</sub> and the Electrochemical Behavior of MXene/Holey MoS<sub>2</sub>Hybrids in Oxygen Reduction Reactions. În: *IFMBE Proceedings, vol 91. Springer, Cham. Volume 1: Nanotechnologies and Nanobiomaterials for Applications in Medicine*. 6th International Conference on Nanotechnologies and Biomedical Engineering, September 20–23, 2023, Chisinau, Moldova , p.249—256. Doi: [10.1007/978-3-031-42775-6\\_28](https://doi.org/10.1007/978-3-031-42775-6_28)

#### **10. Diseminarea rezultatelor obținute în proiect în formă de prezentări la foruri științifice.**

GURBUZ, H.N.; IPEKCI, H.H.; GOREMICHIN, V.; SIMINEL, N.; KULYUK, L.; UZUNOGLU, A. Home 6<sup>th</sup> International Conference on Nanotechnologies and Biomedical Engineering Technological Features of Creating Hole Structures on the Base of MoS<sub>2</sub> and the Electrochemical Behavior of MXene/Holey MoS<sub>2</sub>Hybrids in Oxygen Reduction Reactions – poster

#### **11. Promovarea rezultatelor cercetărilor obținute în proiect în mass-media**

#### **12. Teze de doctorat / postdoctorat susținute și confirmate în anul 2023 de membrii echipei proiectului**

SIMINEL Nikita, Structuri clay-polymer nanocompozite pentru ambalaje alimentare/ Teză de doctorat, conducător: STURZA Rodica, m.cor. AȘM, dr. hab., prof. univ UTM, data susținerii: 08.09.2023

#### **13. Concluzii**

Conducătorul de proiect

Data: 03.01.2024

LȘ

CUIȘTE Leonid



## Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în proiect în anul 2023

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

#### Cifra proiectului: 20.80009.5007.19

Prin reacții chimice de transport au fost obținute monocristalele perfecte ale compusului multiferic  $\text{Fe}_{2-x}\text{Zn}_x\text{Mo}_3\text{O}_8$  cu substituția ionilor de Fe cu Zn, care a permis de a schimba starea magnetică de bază de la antiferomagnetică la ferimagnetică. În monocristalele cu substituția  $x=0.14$  a fost evidențiat un fenomen nou de magnetizare reversibilă care are loc prin starea antiferomagnetică ceea ce deschide o cale nouă de a dirija proprietățile magnetice și polarizarea dielectrică ale dispozitivelor spintronice la nivelul atomic.

Prin metoda depunerii chimice din fază de vapori CVD au fost efectuate cercetări tehnologice în vederea depunerii straturilor 2D de  $\text{MoS}_2$  pe suprafața cristalelor de  $\text{MoSe}_2$ , precum și a straturilor de  $\text{WS}_2$  pe monocristale de  $\text{WSe}_2$ . S-a constatat că pentru obținerea unor heterostructuri calitative de tip van der Waals este strict necesară ajustarea separată a vitezelor fluxurilor vaporilor metalelor de tranziție (Mo, W) și celor de calcogen (S). Au fost identificate condițiile tehnologice optime de obținere a monocristalelor de dicalcogenizi ai metalelor de tranziție DMT, care asigură concentrația maximală a moleculelor de halogen încorporate în rețeaua cristalină a DMT. S-a demonstrat, că cele 9 picuri ale benzii fononice a spectrelor de luminescență ale cristalelor  $\text{MoSe}_2:\text{I}_2$  sunt formate de doar 2 moduri vibraționale, cu frecvențele  $\nu_{\text{ph1}}=144 \text{ cm}^{-1}$  și  $\nu_{\text{ph2}}=190 \text{ cm}^{-1}$ , unul din ele ( $\nu_{\text{ph2}}$ ) aparținând modului local indus de molecula de iod, încorporată în structura stratificată a cristalului gazdă. Au fost examinate posibilitățile fundamentale de modificare a proprietăților electronice ale heterojuncțiunilor van der Waals prin intercalarea moleculelor de halogen în interfața joncțiunii.

Cursul tranziției de spin induse de transferul de sarcină demonstrat de complexul tetranuclear cu punțile de cianură  $[\text{Co}_2\text{Fe}_2(\text{bpy}^*)_4(\text{CN})_6(\text{tp}^*)_2](\text{PF}_6)_2 \cdot 2\text{CP} \cdot 8\text{BN}$  a fost reprodus prin calculele DFT ale energiilor într-un singur punct (energiilor unui sistem multielectronic sub acțiunea potențialului creat de aranjarea dată de atomi) pentru diferite valori ale spinului total al complexului într-un interval larg de temperaturi. O astfel de considerație a permis restabilirea tabloului transformării spinului în compusul examinat, precum și a ordinii de trecere a clusterilor tetranucleare de tipul A, A' și B existente în cristal din starea diamagnetică, care conține ioni metalici  $1s\text{-Co}^{\text{III}}$  și  $1s\text{-Fe}^{\text{II}}$ , în cea paramagnetică care cuprinde numai ionii  $1s\text{-Co}^{\text{II}}$  și  $1s\text{-Fe}^{\text{III}}$ . Determinarea spinului stării fundamentale a sistemului la o temperatură dată prin calcule DFT într-un singur punct și luarea în considerație că în majoritatea cazurilor anume această stare dă contribuția dominantă la proprietățile magnetice la o temperatură definită, se obține o posibilitate să interpreteze calitativ și cantitativ comportamentul magnetic al sistemului examinat într-un interval larg de temperaturi.

Perfect single crystals of the multiferroic compound  $\text{Fe}_{2-x}\text{Zn}_x\text{Mo}_3\text{O}_8$  with substitution of Fe by Zn have been grown by the chemical transport reactions. The substitution allowed to change the magnetic ground state from the antiferromagnetic to ferrimagnetic. A new phenomena of magnetization reversal through the antiferromagnetic state was evidenced in the single crystalline samples with substitution  $x=0.14$ . This offers a new concept for magnetization and polarization control at the atomic level in spintronics devices.

The technological investigations on deposition of the 2D  $\text{MoS}_2$  layers on the surface of  $\text{MoSe}_2$  crystals as well as  $\text{WS}_2$  layers on  $\text{WSe}_2$  single crystals were carried out by the CVD (Chemical Vapour Deposition) method. It was found that for obtaining qualitative van der Waals heterostructures it is strictly necessary to adjust the vapour flow rates of transition metals (Mo, W) and chalcogen (S) separately. Optimal technological conditions for obtaining TMD (Transition metal dichalcogenide) single crystals were identified, which ensure the maximum concentration of halogen molecules embedded in the TMD crystal lattice. It was shown that the 9 peaks of the phonon band of the luminescence spectra of  $\text{MoSe}_2:\text{I}_2$  crystals are formed by only 2 vibrational modes, with frequencies  $\nu_{\text{ph1}} = 144 \text{ cm}^{-1}$  and  $\nu_{\text{ph2}} = 190 \text{ cm}^{-1}$ , one of them ( $\nu_{\text{ph2}}$ ) belonging to the local mode induced by the iodine molecule, embedded in the layered structure of the host crystal. The fundamental possibilities of modifying the electronic properties of van der Waals heterojunctions by intercalation of halogen molecules into the junction interface were examined.

The course of the charge transfer induced spin transition demonstrated by the cyanide-bridged tetranuclear  $[\text{Co}_2\text{Fe}_2(\text{bpy}^*)_4(\text{CN})_6(\text{tp}^*)_2](\text{PF}_6)_2 \cdot 2\text{CP} \cdot 8\text{BN}$  complex has been followed by DFT calculations of the single point energies (energies associated to a multielectron system under the potential created by a given arrangement of atoms) for different total spin values of the complex in a wide temperature range. Such a consideration allowed to restore the picture of spin transformation in the titled compound as well as the order of passing of tetranuclear squares of the type of A, A' and B existing in the crystal from the diamagnetic state containing  $1s\text{-Co}^{\text{III}}$  and  $1s\text{-Fe}^{\text{II}}$  metal ions into the paramagnetic one comprising only  $hs\text{-Co}^{\text{II}}$  and  $1s\text{-Fe}^{\text{III}}$  ions. Determining of the ground state spin of the system at a given temperature through single-point DFT calculations and bearing in mind, that in most cases, namely, this state gives the dominant contribution to the magnetic properties at a definite temperature, one gets a possibility to interpret qualitatively and quantitatively the magnetic behavior of the system in a wide temperature range

Conducătorul de proiect

CULIC Leonid

Data: 03.01.2024

LȘ



**Lista lucrărilor științifice, științifico-metodice și didactice  
publicate în anul 2023 în cadrul proiectului din Programul de Stat**

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

**1. Monografii** (recomandate spre editare de consiliul științific/senatul organizației din domeniile cercetării și inovării)

1.1. monografii internaționale

1.2. monografii naționale

**2. Capitole în monografii naționale/internaționale**

**3. Editor culegere de articole, materiale ale conferințelor naționale/internaționale**

**4. Articole în reviste științifice**

4.1. în reviste din bazele de date Web of Science și SCOPUS (cu indicarea factorului de impact IF)

1. **REU, O.; OSTROVSKY, S.; KLOKISHNER, S.** Modeling of the Charge-Transfer-Induced Spin Transition in the Tetranuclear Cyanide-Bridged [Co<sub>2</sub>Fe<sub>2</sub>] Complex. În: *J Phys Chem A*. 2023, **127(36)**, 7496—7500. Doi: [10.1021/acs.jpca.3c03874](https://doi.org/10.1021/acs.jpca.3c03874) (IF: 2,9).
2. GHARA, S.; VASIN, K.; KAMENSKYI, D.; PRODAN, L.; **TSURKAN, V.**; KÉZSMÁRKI, I.; DEISENHOFER, J. Magnetization reversal through an antiferromagnetic state. În: *Nat Commun*. 2023, **14**, 5174-1—5174-8. Doi: [10.1038/s41467-023-40722-y](https://doi.org/10.1038/s41467-023-40722-y) (IF: 16,6).
3. SUSHKEVICH, K.; **SIMINEL, N.**; SIRKELI, V.; NEDEOGLO, N.; **SIMINEL, A.**; VATAVU, S.; GHILEȚCHII, GH.; IURIEVA, T.; **KULYUK, L.**; NEDEOGLO, D. Luminescent properties of ZnSe crystals doped with group V elements and iodine. În: *Physica B*. 2023, **666**, 415137. Doi: [10.1016/j.physb.2023.415137](https://doi.org/10.1016/j.physb.2023.415137) (IF: 2,8).
4. BREITNER, F.A.; JESCHE, A.; **TSURKAN, V.**; GEGENWART, PH. Thermal decomposition of the Kitaev material  $\alpha$ -RuCl<sub>3</sub> and its influence on low-temperature behavior. În: *Phys Rev B*. 2023, **108(4)**, 0456103. Doi: [10.1103/PhysRevB.108.045103](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.108.045103) (IF: 3,908).
5. **PRODAN, L.**; EVANS, D.M.; GRIFFIN, S.M.; OSTLIN, A.; ALTHALER, M.; LYSNE, E.; **FILIPPOVA, I.G.**; SHOVA, S.; CHIONCEL, L.; **TSURKAN, V.**; KEZSMARKI, I. Large ordered moment with strong easy-plane anisotropy and vortex-domain pattern in the kagome ferromagnet Fe<sub>3</sub>Sn. În: *Appl Phys Lett*. 2023, **123(2)**, 021901-1—021901-6. Doi: [10.1063/5.0155295](https://doi.org/10.1063/5.0155295) (IF: 4).
6. TOOTH, B.; AMELIN, K.; ROOT, T.; NAGEL, U.; BAUERNFEIND, A.; **TSURKAN, V.**; **PRODAN, L.**; KRUG VON NIDDA, H.-A.; SCHEFFLER, M.; KEZSMARKI, I.; BORDACS, S. Broadband magnetic resonance spectroscopy in MnSc<sub>2</sub>S<sub>4</sub>. În: *Sci Rep*. 2023, **13**, 11069-1—11069-7. Doi: [10.1038/s41598-023-37911-6](https://doi.org/10.1038/s41598-023-37911-6) (IF: 4,996).
7. LOZOVAN, V.; KRAVTSOV, V.CH.; CHUMAKOV, Y.M.; COSTRIUCOVA, N.V.; **SIMINEL, N.**; PETUHOV, O.; VLASE, T.; VLASE, G.; BARBA, A.; FONARI, M.S. Zn(II) and Cd(II) Metal–Organic Frameworks with Azine-Functionalized Pores: Crystal Structures, Photoluminescence,

- Solvent Exchange, and Molecular Simulations of Carbon Dioxide Binding Sites. În: *Cryst Growth Des.* 2023, **23**(5), 3171—3185. Doi: [10.1021/acs.cgd.2c01345](https://doi.org/10.1021/acs.cgd.2c01345) (IF: 4,01).
8. **SIMINEL, N.**; SUSHKEVICH, K.; AAZOU, S.; MICU, A.; **SIMINEL, A.**; SEKKAT, Z.; **KULYUK, L.** Bound exciton luminescence and phonon sideband analysis of iodine intercalated bulk 2H-MoSe<sub>2</sub> crystals. În: *Opt Mater Express.* 2023, **13**(4), 886—891. Doi: [10.1364/OME.482929](https://doi.org/10.1364/OME.482929) (IF: 3,074).
  9. **PAVLENKO, V.**; BELOUSSOV, I. Amplified spontaneous emission from CdSe/CdS/CdZnS quantum dot films. În: *J Lumin.* 2023, **257**, 119643. Doi: [10.1016/j.jlumin.2022.119643](https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2022.119643) (IF: 4,171).
  10. PLOKHIKH, I., FABELO, O.; **PRODAN, L.**; WÖRLE, M.; POMJAKUSHINA, E.; CERVELLINO, A.; **TSURKAN, V.**; KÉZSMÁRKI, I.; ZAHARKO, O. Magnetic and crystal structure of the antiferromagnetic skyrmion candidate GdSb<sub>0.71</sub>Te<sub>1.22</sub>. În: *J Alloy Compd.* 2023, **936**, 168348-1—168348-6 Doi:[10.1016/j.jallcom.2022.168348](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2022.168348) (IF: 6,371).
  11. **NAZAROV, M.**; SPASSKY, D.; BRIC, M.G.; TSUKERBLAT, B. About the nature of luminescent bands in undoped and Eu<sup>2+</sup> doped SrAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub> phosphors. În: *Opt Mater.* 2023, **145**, 114377. Doi: [10.1016/j.optmat.2023.114377](https://doi.org/10.1016/j.optmat.2023.114377) (IF: 3,9).

4.2. în alte reviste din străinătate recunoscute

12. **NAZAROV, M.** Combustion Synthesis of SrAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>:Eu<sup>2+</sup> Phosphor. Photoluminescence and Cathodoluminescence at Low Temperatures. În: *Surf Eng Appl Elect.* 2023, 59(4), 542—548. Doi: 10.3103/S1068375523040117.

4.3. în reviste din Registrul National al revistelor de profil, cu indicarea categoriei

4.4. în alte reviste naționale

## 5. Articole în culegeri științifice naționale/internaționale

5.1. culegeri de lucrări științifice editate peste hotare

5.2 culegeri de lucrări științifice editate în Republica Moldova

## 6. Articole în materiale ale conferințelor științifice

6.1. în lucrările conferințelor științifice internaționale (peste hotare)

13. **KULIKOVA, O.**; DANILESCU, O.; BOUROSH, P.; CROITOR, L. Photoluminescence and absorption of the mononuclear Cd(II) coordination compound. În: *Proceedings. of the IX Ukrainian Scientific Conference on Physics of Semiconductors (USCPS-9).*— Ужгород, 2023. p.259-260.

6.2. în lucrările conferințelor științifice internaționale (Republica Moldova)

14. DANILESCU, O.; CROITOR, L.; BULHAC, I.; BOUROSH, P.; **KULIKOVA, O.** 2,6-diacetylpyridine dihydrazone ligands – chemosensors for Cd<sup>2+</sup> detection. În: *Proceedings. of the X International conference. "Instruire prin cercetare pentru o societate prosperă".* 18-19 martie 2023, Chisinau, p.106-109.

6.3. în lucrările conferințelor științifice naționale cu participare internațională

6.4. în lucrările conferințelor științifice naționale

## 7. Teze ale conferințelor științifice

7.1. în lucrările conferințelor științifice internaționale (peste hotare)

15. **PRODAN, L.**; HEMMIDA, M.; KRUG VON NIDDA, H-A.; CHIONCEL, L.; TSURKAN, V.; KÉZSMARKI, I.; Magnetocrystalline Anisotropy in Ferromagnetic Fe-Sn Kagome Magnets. În: *The Joint European Magnetic Symposia (JEMS) 27th August to 1st September 2023* Spaine, Madrid, Book of Abstracts, p.390.
16. DOERR, M. DEEB, M. GRUMBACH J., ROTTER M., **TSURKAN V.**, A. MIYATA, S. ZHERLITSYN, J. Wosniza Magnetoelastic Properties of MnSc<sub>2</sub>S<sub>4</sub>. În: *The Joint European Magnetic Symposia (JEMS) 27th August to 1st September 2023* Spaine, Madrid, Book of Abstracts, p.392
17. DANILESCU O.; BULHAC I.; CROITOR L.; BOUROSH P, **KULIKOVA O.** Nitrate of 2,6-Diacetylpyridine-bis(Picolinoylhydrazone)-(Aqua)(Nitrate)Cadmium(Ii)-Monohydrate with Photoluminescence Properties În: *IX- Salonul Internațional de Invenții și Inovații „Traian Vuia” Timoșoara, România, 15.06 - 17.06, 2023* Book of Abstracts, p.138-139.
18. **PRODAN, L., FELEA, V.**, SKOURSKII, Y., ZHERLITSYN, S., WOSNITZA, J., TSIRLIN, A., **TSURKAN, V.**, KEZSMARKI, I. Coexistence of antiferromagnetism and ferrimagnetism in adjacent honeycomb layers. În: *Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft. 2023, 3.* p. 406. ISSN: 2751-0522.
19. **PRODAN, L., FILIPPOVA, I.**, TSIRLIN, A., **TSURKAN, V.**, KEZSMARKI, I. Dilution of polar antiferromagnet Co<sub>2</sub>Mo<sub>3</sub>O<sub>8</sub>. În: *Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft. 2023, 3.* p. 421. ISSN: 2751-0522.
20. SZALLER, D., **PRODAN, L.**, KORBINIAN, G., **FELEA, V.**, SKOURSKI Y., GORBUNOV, D., FORSTER, T., HELM, T., NOMURA, T., MIYATA, A., ZHERLITSYN, S., WOSNITZA, J., TSIRLIN, A., **TSURKAN, V.**, KEZSMARKI, I. Coexistence of antiferromagnetism and ferrimagnetism in adjacent honeycomb layers. În: *Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft. 2023, 3.* p. 452. ISSN: 2751-0522.

7.2. în lucrările conferințelor științifice internaționale (Republica Moldova)

21. GURBUZ, H.N.; IPEKCI, H.H.; **GOREMICHIN, V.**; **SIMINEL, N.**; **KULYUK, L.**; UZUNOGLU, A. Home 6th International Conference on Nanotechnologies and Biomedical Engineering Technological Features of Creating Hole Structures on the Base of MoS<sub>2</sub> and the Electrochemical Behavior of MXene/Holey MoS<sub>2</sub> Hybrids in Oxygen Reduction Reactions. În: *IFMBE Proceedings, vol 91. Springer, Cham. Volume 1: Nanotechnologies and Nano-biomaterials for Applications in Medicine.* 6th International Conference on Nanotechnologies and Biomedical Engineering, September 20–23, 2023, Chisinau, Moldova, p. 249—256. Doi: [10.1007/978-3-031-42775-6\\_28](https://doi.org/10.1007/978-3-031-42775-6_28).

7.3. în lucrările conferințelor științifice naționale cu participare internațională

7.4. în lucrările conferințelor științifice naționale

## 8. Alte lucrări științifice (recomandate spre editare de o instituție acreditată în domeniu)

8.1. cărți (cu caracter informativ)

8.2. enciclopedii, dicționare

8.3. atlase, hărți, albume, cataloage, tabele etc. (ca produse ale cercetării științifice)

## 9. Brevete de invenții și alte obiecte de proprietate intelectuală, materiale la saloanele de invenții



## **10. Lucrări științifico-metodice și didactice**

- 10.1. manuale pentru învățământul preuniversitar (aprobate de ministerul de resort)
- 10.2. manuale pentru învățământul universitar (aprobate de consiliul științific /senatul instituției)
- 10.3. alte lucrări științifico-metodice și didactice

**Executarea devizului de cheltuieli,  
conform anexei nr. 2.3 din contractul de finanțare pentru anul 2023**

**Cifrul proiectului: 20.80009.5007.19**

| <b>Cheltuieli, mii lei</b>  |                     |                |                          |                 |
|---|---------------------|----------------|--------------------------|-----------------|
| <b>Denumirea</b>  | <b>Cod</b>          |                | <b>Anul de gestiune</b>  |                 |
|   | <b>Eco<br/>(k6)</b> | <b>Aprobat</b> | <b>Modificat<br/>+/-</b> | <b>Precizat</b> |
| Remunerarea muncii angajaților conform statelor                               | 211180              | 2252,3         |                          | 2252,3          |
| Contribuții de asigurări de stat obligatorii                                  | 212100              | 540,6          |                          | 540,6           |
| Servicii de editare   | 222910              | 1,0            |                          | 1,0             |
| Servicii neatribuite altor aliniate   | 222990              | 17,0           |                          | 17,0            |
| Îndemnizația pentru incapacitatea temporară de munca                          | 273500              | 4,5            |                          | 4,5             |
| Alte prestații sociale ale angajatorilor                                      | 273900              |                | +80,0                    | 80,0            |
| Procurarea mașinilor și utilajelor  | 314110              | 40,2           |                          | 40,2            |
| Procurarea pieselor de schimb   | 332110              | 1,1            |                          | 1,1             |
| Procurarea materialelor pentru scopuri didactice, științifice și alte scopuri | 335110              | 14,0           |                          | 14,0            |
| Procurarea materialelor de uz gospodăresc și rechizitelor de birou            | 336110              | 0,5            |                          | 0,5             |
| <b>Total</b>  |                     | <b>2871,2</b>  | <b>80,0</b>              | <b>2951,2</b>   |

Rector USM

ȘAROV Igor

Contabil șef

COJOCARU Liliانا

Conducătorul de proiect

CULIUC Leonid

Data: 03.01.2024

LȘ

## Componența echipei conform contractului de finanțare 2023

Cifrul proiectului: 20.80009.5007.19

| Echipa proiectului conform contractului de finanțare (la semnarea contractului) pentru 2023 |   |                  |                                      |  |                   |                    |
|---|---|------------------|--------------------------------------|--|-------------------|--------------------|
| Nr  | Nume, prenume<br>(conform contractului de<br>finanțare) | Anul<br>nașterii | Titlul științific                    | Norma de<br>muncă<br>conform<br>contractului | Data<br>angajării | Data<br>eliberării |
| 1.  | Clochișner Sofia  | 1949             | Cercetător științific<br>principal   | 1.00   | 02.01.2023        | 31.12 2023         |
| 2.  | Culiuc Leonid   | 1950             | Cercetător științific<br>principal   | 1.00   | 02.01.2023        | 31.12 2023         |
| 3.  | Ostrovshii Serghei                                      | 1968             | Cercetător științific<br>principal   | 1.00   | 02.01.2023        | 31.12 2023         |
| 4.  | Țurcan Vladimir   | 1951             | Cercetător științific<br>principal   | 1.00   | 02.01.2023        | 31.12 2023         |
| 5.  | Filippova Irina   | 1955             | Cercetător științific<br>coordonator | 1.00   | 02.01.2023        | 31.12 2023         |
| 6.  | Kulikova Olga   | 1952             | Cercetător științific<br>coordonator | 1.00   | 02.01.2023        | 31.12 2023         |
| 7.  | Reu Oleg  | 1976             | Cercetător științific<br>coordonator | 1.00   | 02.01.2023        | 31.12 2023         |
| 8.  | Siminel Anatolii  | 1956             | Cercetător științific<br>coordonator | 1.00   | 02.01.2023        | 31.12 2023         |
| 9.  | Nazarov Mihail  | 1946             | Cercetător științific<br>coordonator | 0.50   | 02.01.2023        | 31.12 2023         |
| 10.   | Sușchevici Constantin                                   | 1943             | Cercetător științific<br>coordonator | 0.50   | 02.01.2023        | 31.12 2023         |
| 11.   | Croitori Dorina   | 1990             | Cercetător științific<br>superior    | 1.00   | 02.01.2023        | 31.12 2023         |
| 12.   | Croitori Dorina   | 1990             | Cercetător științific<br>superior    | 0.50   | 02.01.2023        | 31.12 2023         |
| 13.   | Roman Marianna  | 1985             | Cercetător științific<br>superior    | 1.00   | 02.01.2023        | 31.12 2023         |
| 14.   | Roman Marianna  | 1985             | Cercetător științific<br>superior    | 0.25   | 02.01.2023        | 31.12 2023         |
| 15.   | Prodan Lilian   | 1991             | Cercetător științific<br>superior    | 0.25   | 02.01.2023        | 31.12 2023         |
| 16.   | Micu Alexandru  | 1963             | Cercetător științific<br>superior    | 1.00   | 02.01.2023        | 31.12 2023         |
| 17.   | Siminel Nikita  | 1987             | Cercetător științific<br>superior    | 1.00   | 02.01.2023        | 31.12 2023         |
| 18.   | Lascova-Baciu Renata                                    | 1980             | Cercetător științific                | 1.00   | 02.01.2023        | 31.12 2023         |
| 19.   | Slobodeniuc Constantin                                  | 1957             | Cercetător științific                | 1.00   | 02.01.2023        | 31.12 2023         |
| 20.   | Goremîchin Vladimir                                     | 1952             | Cercetător științific                | 0.75   | 02.01.2023        | 31.12 2023         |
| 21.   | Hustuc Alexandru  | 1971             | Cercetător științific<br>stagiar     | 0.25   | 02.01.2023        | 31.12 2023         |
|   | <b>În total</b>   |                  |                                      | <b>17,0</b>                                  |                   |                    |

Ponderea tinerilor (%) din numărul total al executorilor conform contractului de finanțare

15,8%

