

**RECEPȚIONAT**

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

\_\_\_\_\_ 2024

**AVIZAT**

Secția AȘM \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_ 2024

**RAPORT ȘTIINȚIFIC FINAL**  
**pentru perioada 2020-2023**  
**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



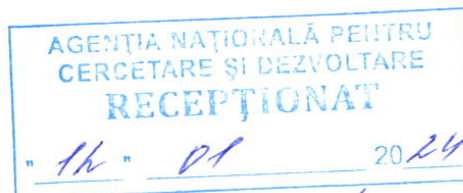
Consiliul științific al IFA

ȘIKIMAKA Olga

Conducătorul proiectului

CULIUC Leonid

L.Ș.



Chișinău 2024

## CUPRINS:

1. Scopul proiectului 2020-2023
2. Obiectivele proiectului 2020–2023
3. Rezultate planificate conform proiectului depus
4. Rezultatele obținute
5. Impactul științific, social și/sau economic al rezultatelor științifice obținute în cadrul proiectului
6. Infrastructura de cercetare utilizată în cadrul proiectului
7. Colaborare la nivel național/ 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. Aprecierea și recunoașterea rezultatelor obținute în proiect
12. Promovarea rezultatelor cercetărilor obținute în proiect în mass-media
13. Teze de doctorat / postdoctorat susținute și confirmate pe parcursul anilor 2020-2023 de membrii echipei proiectului
14. Materializarea rezultatelor obținute în proiect
15. Informație suplimentară referitor la activitățile membrilor echipei
16. Recomandări, propuneri
17. Concluzii
18. Anexa nr. 1. Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în proiect perioada 2020-2023
19. Anexa nr. 2. Lista lucrărilor științifice, științifico-metodice și didactice publicate pentru anii 2020-2023
20. Anexa nr. 3. Volumul total al finanțării proiectului 2020-2023
21. Anexa nr. 4. Componența echipei pe parcursul anilor 2020-2023
22. Anexa nr. 5 Raportarea indicatorilor în cadrul proiectului Programe de Stat 2020-2023

## 1. Scopul proiectului

Proiectul este focalizat asupra obținerii, cercetării și modelării materialelor noi bi- și tridimensionale cu proprietăți magnetice, optice și dielectrice/semiconductoare dirijate, sintetizate în baza metalelor de tranziție pentru aplicații în spintronică, opto- și nanoelectronică. Obiectele de studii sunt următoarele: (i) materialele magnetice polare cu structura spinel lacunară  $AB_4X_8$  ( $A=Ga, Al, Ge$ ;  $B=V, Nb, Ta$ ;  $X=S, Se$ ) cu obiecte spin-vortex de tip skyrmion cu dimensionalitate nanometrică; (ii) compușii polari  $Me_2Mo_3O_8$  ( $Me=Mn, Fe, Co$ ) cu structura hexagonală; (iii) cristalele stratificate, nanolamelele exfoliate și filmele ultrasubțiri bidimensionale (2D) ale dicalcogenizilor metalelor de tranziție  $TX_2$  ( $T=Mo, W$ ;  $X=S, Se$ ), pure, dopate cu metale de tranziție și intercalate cu molecule de halogeni, precum și heterostructurile semiconductoare lamelare de tip van der Waals, filme 2D cu compoziție diferită; (iv) sistemele moleculare, care manifestă tranziții de spin sub acțiunea externă. Relevarea mecanismelor microscopice, care guvernează comportamentul magnetic și spectroscopic reglabil al seriei de compuși cu stări electronice labile. Elaborarea criteriilor pentru designul rațional al noilor materiale comutabile magnetice și optice destinate aplicațiilor practice în dispozitive nanoelectronice.

## 2. Obiectivele proiectului 2020–2023

Elaborarea tehnologiilor de obținere a compușilor magnetici polari cu structura spinel lacunară de tip  $AB_4X_8$  ( $A=Ga, Al, Ge$ ;  $B=V, Nb, Ta$ ;  $X=S, Se$ ) și  $Me_2Mo_3O_8$  ( $Me=Mn, Fe, Co$ ) cu structura hexagonală în forma poli- și monocristalină. Caracterizarea structurii cristaline și transformărilor structurale. Cercetarea proprietăților magnetice prin magnetometria SQUID, rezonanța electronică de spin, împrăștierea neutronilor, rezonanța magnetică nucleară, propagarea ultrasunetului în câmpuri magnetice înalte în scopul determinării stării magnetice de bază, caracterului tranzițiilor magnetice și corelațiilor magnetostructurale. Elucidarea diagramelor de faze magnetice, comportamentului multiferroic și ordonării polare.

Elaborarea tehnologiilor de creștere a cristalelor 3D de compuși  $TX_2$  dopați cu metale de tranziție diferite de Mo și W. Optimizarea condițiilor tehnologice în vederea intercalării controlate a cristalelor lamelare cu molecule de halogen. Elaborarea procedeelelor de obținere a eșantioanelor în forma de nano-folii cristaline 2D cu grosimea de doar unul, sau câteva monostraturi atomice, a tehnologiilor dedepunere chimică din faza de vapori (metoda CVD) a filmelor ultrasubțiri pe suport dielectrice și semiconductori și de fabricare a heterostructurilor van der Waals din monostraturi  $TX_2$ . Cercetarea experimentală a caracteristicilor optice (inclusiv luminescente și optic neliniare), magneto-optice și fotoelectrice ale nano-straturilor obținute, determinate de procesele de recombinare a excitonilor liberi și legați, de impuritățile activatoare, precum și de procesele electronice ce pot avea loc la interfața straturilor heterostructurilor van der Waals.

Identificarea mecanismelor microscopice, care guvernează proprietățile magnetice și spectroscopice ale noilor materiale moleculare comutabile, ce manifestă tranziții de spin, precum sunt: compusul tris(chelat)[Fe<sup>II</sup>(EtL)<sub>3</sub>](PF<sub>6</sub>)<sub>2</sub> cu crossoverul de spin extraordinar în ionul Fe<sup>II</sup>

situat în înconjurare octaedrică  $S_6$  a ionilor de sulf; complecșii trinucleari lineari ai  $Fe^{II}$ ; clusterii tetranucleari  $[Fe_4(H_2L)_{4-n}(HL)_n](BF_4)_{8-n} \cdot xMeCN$  ( $n=0, 2, 4$ ) cu protonii adăugați; compusul heterometalic  $[Co_2Fe_2(bpy^*)_4(CN)_6(tp^*)_2](PF_6)_2 \cdot 2CP \cdot 8BN$ , care manifestă tranziția de spin în trei trepte. Elaborarea abordărilor teoretice noi pentru descrierea comportamentului magnetic și spectroscopic al acestor compuși. Estimarea potențialului materialelor studiate pentru aplicații.

### 3. Rezultate planificate conform proiectului depus

Va fi elaborată tehnologia de sintetizare și creștere a monocristalelor compușilor noi  $AB_4X_8$  ( $A=Ga, Al, Ge; B=V, Mo, Nb, Ta; X=S, Se$ ) cu structura spinel lacunară și compușilor  $Me_2Mo_3O_8$  ( $Me=Mn, Fe, Co$ ) cu structura hexagonală și vor fi obținute monocristale perfecte ale acestor materiale. Vor fi determinați parametrii principali structurali, magnetici, și dielectrici ale materialelor obținute. Vor fi stabilite stările magnetice și electronice de bază, configurațiile spinilor în starea ordonată, determinate diagramele de faze magnetice, skyrmion, și feroelectrice în compuși cu diferite compoziții de cation și anion. Vor fi evidențiate excitările electronice, dinamica de sarcină și de spin în stările polare și nepolare.

Vor fi elaborate: tehnologii de creștere a cristalelor  $TX_2$  dopate cu metale de tranziție diferite de Mo și W și stabilite condițiile, ce vor asigura intercalarea controlată a compușilor lamelari cu molecule de halogen; procedee de obținere a nano-foliilor cristaline 2D cu grosimi atomare; tehnologii de depunere chimică din faza de vapori (metoda CVD) a filmelor ultrasubțiri de  $TX_2$  pe suporti dielectrici și de fabricare a heterostructurilor van der Waals prin stivuirea monostraturilor cu compoziție diferită. Vor fi cercetate proprietățile optice, magneto-optice și fotoelectrice ale nano-straturilor și structurilor obținute. Vor fi studiate procesele de recombinare a excitonilor liberi și legați, ale trionilor, impactul impurităților asupra proprietăților optice ale compușilor, precum și stările excitonice la interfața joncțiunilor heterostructurilor van der Waals.

Modelarea caracteristicilor magnetice și spectroscopice ale materialelor obținute și cercetate experimental pe parcursul derularii proiectului dat. Modelul crossoverului de spin în complecșii în care ionul  $Fe^{II}$  se află în înconjurare octaedrică a ionilor de sulf. Descrierea caracteristicilor magnetice experimentale ale compusului  $[Fe^{II}(EtL)_3](PF_6)_2$  de tip tris(chelate). Abordarea teoretică pentru studiul crossoverului de spin în complecșii trinucleari ai  $Fe^{II}$  cu forma diferită. Explicarea acestui fenomen în complexul linear  $[Fe_3(bntrz)_6(tcnsset)_6]$ . Interpretarea cu ajutorul calculelor DFT a comportamentului magnetic a complecșilor tetranucleari  $[Fe_4(H_2L)_{4-n}(HL)_n](BF_4)_{8-n} \cdot xMeCN$  ( $n=0,2,4$ ) în dependență de gradul de deprotonare a liganzilor. Modelul tranzițiilor de spin induse de transferul sarcinii în complexul  $[Co_2Fe_2(bpy^*)_4(CN)_6(tp^*)_2](PF_6)_2 \cdot 2CP \cdot 8BN$ . Descrierea caracteristicilor magnetice experimentale.

### 4. Rezultatele obținute

Au fost elaborate regimurile tehnologice de sintetizare în starea solidă și obținute policristalele unifazice a compușilor cu structura spinel lacunară de tip  $GaV_4S_8$ ,  $GaV_4Se_8$  (2020),  $GaNb_4S_8$ ,  $AlV_4S_8$  (2021),  $GaTa_4Se_8$  (2022), și  $GaV_4S_8$  dopate cu Ge (2023). Folosind difracția cu

raze X a fost efectuat studiul structural și determinată simetria structurilor cristaline ale acestor materiale și parametrii rețelelor cristaline. A fost stabilit, că compușii  $\text{GaNb}_4\text{S}_8$  și  $\text{AlV}_4\text{S}_8$  se cristalizează în structura de tip spinel lacunară cubică cu simetria  $F43m$  și parametrii rețelei, respectiv 9.9671 și 9.6397 Å, iar  $\text{GaTa}_4\text{Se}_8$  are parametrul rețelei 10.3955 Å.

A fost elaborată tehnologia de obținere prin reacții chimice de transport și crescute monocristalele perfecte ale compușilor  $\text{GaV}_4\text{S}_8$ ,  $\text{GaV}_4\text{Se}_8$ ,  $\text{GaNb}_4\text{S}_8$ ,  $\text{AlV}_4\text{S}_8$ ,  $\text{GaTa}_4\text{Se}_8$ , și  $\text{GaV}_4\text{S}_8$  dopate cu Ge. Folosind magnetometria SQUID au fost cercetate proprietățile magnetice ale cristalelor obținute în regiunea temperaturilor 2 - 400 K și câmpuri magnetice până la 5 T. Cercetările magnetizării și capacității termice au depistat tranziții Jahn-Teller și magnetice consecutive în compușii  $\text{GaV}_4\text{S(Se)}_8$  la temperaturi joase. Investigațiile compusului  $\text{AlV}_4\text{S}_8$  au depistat independența de temperatură a susceptibilității magnetice în regiunea 400 - 30 K, iar la temperaturi mai joase de 11 K a fost observată ordonarea feromagnetică. Pentru compusul  $\text{GaNb}_4\text{S}_8$  a fost evidențiată tranziția magnetică la temperatura 32 K cu scăderea bruscă a susceptibilității datorită formării stării de tip spin-singlet. În compusul  $\text{GaTa}_4\text{Se}_8$  a fost depistată dependența de temperatură a susceptibilității magnetice de tip Curie-Weiss pentru regiunea 400 - 200 K, iar la temperatura de  $T_m=52$  K a fost observată o tranziție în stare de tip spin-singlet. Cercetările proprietăților dielectrice și rezistive ale compusului  $\text{GaTa}_4\text{Se}_8$  au evidențiat anomalia constantei dielectrice la temperatura  $T_m$  unde are loc tranziția structurală și magnetică simultană. La  $T_m$  rezistivitatea monocristalelor  $\text{GaTa}_4\text{Se}_8$  manifestă un salt de circa trei ordine de mărime cu schimbări semnificative ale energiei de activare a purtătorilor de sarcină. S-a presupus formarea stării antipolare în compusul  $\text{GaTa}_4\text{Se}_8$  la temperaturi mai joase de  $T_m$ .

Au fost elaborate regimurile tehnologice de sintetizare în starea solidă și obținute policristalele unifazice a compușilor  $\text{Co}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$ ,  $\text{Fe}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$  și  $\text{Mn}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$  și compusului  $\text{Fe}_{1.86}\text{Zn}_{0.14}\text{Mo}_3\text{O}_8$  cu structura hexagonală. A fost efectuat studiul structural, care a permis de a determina simetria structurilor cristaline ale acestor materiale și parametrii rețelelor cristaline. Compusul  $\text{Fe}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$  se cristalizează în structura hexagonală, grupul de simetrie  $P6_3mc$  cu parametrii rețelei cristaline  $a = b = 5.7656$  și  $c = 10.041$  Å, iar compusul  $\text{Mn}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$  are parametrii rețelei cristaline  $a = b = 5.7893(1)$  și  $c = 10.2560(1)$  Å.

A fost elaborată tehnologia de creștere prin reacții chimice de transport și obținute monocristalele perfecte ale compușilor  $\text{Co}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$ ,  $\text{Fe}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$  și  $\text{Mn}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$ , și  $\text{Fe}_{1.86}\text{Zn}_{0.14}\text{Mo}_3\text{O}_8$ . Cercetările magnetice au evidențiat ordonarea antiferromagnetică pentru compușii  $\text{Fe}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$  și  $\text{Co}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$ , respectiv la temperaturi mai joase de 60 și 40 K. În compusul  $\text{Fe}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$  a fost depistată anizotropia substanțială a susceptibilității magnetice măsurate de-a lungul și perpendicular axei  $c$ . Au fost determinați parametrii magnetici principali, anume, momentul magnetic efectiv de  $5.53 \mu_B/\text{Fe}$  pentru câmpul magnetic paralel axei  $c$  și de  $5.22 \mu_B/\text{Fe}$  pentru câmpul magnetic perpendicular axei  $c$ . Temperatura Curie-Weiss respectivă are valori de -28.5 K și -94.6 K pentru aceste două configurații diferite, ceea ce indică dominarea interacțiunilor antiferromagnetice în planurile  $ab$  „honeycomb” comparativ cu cele de-a lungul axei  $c$ . În compusul  $\text{Mn}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$  a fost stabilită ordonarea ferimagnetică la temperaturi mai joase de 40 K. La temperatura 2 K a fost observată tranziția spin-flop în câmpul magnetic de 4 T aplicat de-a lungul axei  $c$ . A fost determinat momentul magnetic efectiv de  $5.9 \mu_B/\text{Mn}$  pentru câmpul magnetic

paralel axei  $c$  și de  $5.7 \mu_B/\text{Mn}$  pentru câmpul magnetic perpendicular axei  $c$ . Temperatura Curie-Weiss are valoarea de  $-104 \text{ K}$  pentru aceste două configurații diferite, ceea ce indică dominarea interacțiunilor antiferomagnetice.

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 multiferoici de tip  $\text{Fe}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$  cu structura hexagonală prin dopare și substituții cationice. S-a stabilit că doparea cu germanium permite de a mări substanțial (până la 4 ordine) valoarea conductibilității electrice a cristalelor  $\text{GaV}_4\text{S}_8$ . În compusul multiferoic  $\text{Fe}_{1.86}\text{Zn}_{0.14}\text{Mo}_3\text{O}_8$  s-a stabilit că ionii de Zn substituie ionii de Fe preponderent în pozițiile octaedrice. În același timp are loc schimbare a stării magnetice de bază de la antiferomagnetică la ferimagnetică. În acest compus a fost evidențiat un fenomen nou de magnetizare reversibilă, care are loc prin intermediul stării antiferomagnetice. Acest mecanism a fost confirmat prin cercetările polarizării dielectrice, care manifestă piscuri acute la câmpul coercitiv. Studiile spectroscopice complementare în regiunea THz au evidențiat reapariția modei magnonice, care este prezentă numai în starea antiferomagnetică.

Au fost crescute cristale lamelare de  $\text{MoS}_2$ ,  $\text{MoSe}_2$  și  $\text{WSe}_2$  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 au fost depistate noi benzi în domeniul infraroșu (IR).. Prin exfoliere mecanică au fost preparate monostraturi atomice de  $\text{WS}_2:\text{Br}_2$ , identificate prin spectroscopia FL. Au fost elaborate și construite 3 cuptoare tehnologice bizonale noi, cu izolare termică sporită (asigurată prin folosirea materialelor termoizolatoare avansate), dotate cu sisteme electronice de reglare precisă a temperaturii dirijate de calculator; au fost organizate condiții de laborator, indispensabile pentru exfolierea nanostraturilor cristaline de  $\text{TX}_2$ , a fost asamblat un stand tehnologic de CVD a straturilor  $\text{MoS}_2$  2D, care au permis obținerea filmelor ultrasubțiri "insulare" în formă triunghiulară cu latura de până la  $40 \mu\text{m}$ ; a fost perfecționată instalația experimentală de spectroscopie luminescentă, dotând-o cu opțiunea de baleiaj a suprafețelor eșantioanelor cu dimensiuni submilimetrice cu o rezoluție spațială de circa 10 micrometri, ceea ce a asigurat posibilitatea depistării și caracterizării foliilor 2D cu grosimi monoatomare.

A fost stabilit, că luminescența excitonilor legați de moleculele de halogen, adsorbite pe suprafața unui strat monoatomic 2D de  $\text{WS}_2$  manifestă distribuție spectrală calitativ diferită de cea a luminescenței excitonilor legați de aceleași molecule biatomare, incorporate în interstițiul van der Waals al eșantioanelor de  $\text{WS}_2$  masive (bulk). Prin efectuarea calculului teoretic DFT, au fost stabilite particularitățile spectrului energetic, induse de moleculele halogenului de pe suprafața monostraturilor  $\text{WS}_2:\text{Br}_2$ , identificată poziționarea spațială a halogenului adsorbit și propus un model teoretic pentru descrierea proceselor de recombinare radiativă a excitonilor legați 2D. A fost cercetată evoluția spectrelor de emisie a excitonilor legați în cristalele de  $\text{WS}_2:\text{Br}_2$  și  $\text{MoS}_2$   $\text{Cl}_2$ ,  $\text{I}_2$  în câmpuri magnetice intense (de până la 30T). În baza analizei datelor Zeeman a fost determinat  $g$ -factorul și stabilită structura fină a spectrului excitonic, fiind identificate stările "întunecate"(dark) și cele "luminoase" (bright). A fost cercetată cinetica recombinării radiative a

excitonilor legați în cristalele de seleniură de molibden intercalate cu iod. În premieră a fost depistat, că în intervalul de temperaturi 30-50K, dependența timpilor de scădere a luminescenței în funcție de temperatură  $\tau_R(T)$  manifestă un maximum, care nu se observă în cazul altor cristale de  $TX_2$  intercalate cu molecule de halogen ( $Cl_2$ ,  $Br_2$  sau  $I_2$ ). A fost stabilit, că acest maximum în dependența  $\tau_R(T)$  se atestă la temperatura de disociere a excitonilor, iar prezența lui denotă faptul, că populația stărilor energetice ale excitonilor legați în compușii  $TX_2$  deviază de la condițiile echilibrului termodinamic. A fost arătat, că dependențele  $\tau_R(T)$  obținute pentru alți compuși  $TX_2$  intercalati cu halogeni manifestă comportament monotonic, întrucât valorile intervalelor energetice  $\Delta$  între nivelele excitonice caracteristice acestor compuși, sunt mult mai mici decât în cazul cristalelor  $MoSe_2:I_2$  ( $\Delta_{AB}=6$  meV).

Prin metoda depunerii chimice din fază de vapori CVD au fost efectuate cercetări tehnologice în vederea depunerii straturilor 2D de  $MoS_2$  pe suprafața cristalelor de  $MoSe_2$ , precum și a straturilor de  $WS_2$  pe monocristale de  $WSe_2$ . 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 asigura 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  $MoSe_2:I_2$  sunt formate de doar 2 moduri vibraționale, cu frecvențele  $\nu_{ph1}=144$   $cm^{-1}$  și  $\nu_{ph2}=190$   $cm^{-1}$ , unul din ele ( $\nu_{ph2}$ ) 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.

Au fost efectuate calculele DFT (funcționala B3LYP împreună cu funcțiile monoelectronice def2-TZVP și seturile auxiliare def2/J, def2-TZVP/C pentru partea interacțiunii Coulombiene și calculele de corelare, respectiv; aproximația RIJCOSX pentru accelerarea calculelor) ale energiilor într-un singur punct pentru cationul  $[Fe^{II}(EtL)_3]^{2+}$  și molecula neutră  $[Fe^{II}(EtL)_3](PF_6)_2$ , în care ionul  $Fe^{II}$  se află în înconjurarea liganzilor de sulf, neobișnuită pentru sistemele cu crossoverul de spin, fiindcă liganzii de sulf creau câmpul cristalin slab. A fost reprodus cursul transformării spinului în intervalul de temperaturi 100-298K și demonstrat că independent de faptul că molecula este neutră sau încărcată pozitiv tranziția între stările cu spinul  $S=0$  și  $S=2$  ai fierului are loc la temperaturi mai înalte de 250K.

A fost propusă tratarea teoretică nouă pentru descrierea crossoverului de spin în complexii mononucleari  $[Co(pyterpy)_2](PF_6)_2$ ,  $[Co(pyterpy)_2](TCNQ)_2 \cdot DMF \cdot MeOH$  și  $[Co(pyterpy)_2](TCNQ)_2 \cdot MeCN \cdot MeOH$  I ai  $Co^{II}$ . Modelul ține cont de interacțiunile cooperative electron-deformaționale și cea Jahn-Teller, care apare din cuplajul stării cu spin mic a ionului  $Co^{II}$  cu vibrațiile tetragonale ale înconjurării apropiate. A fost demonstrat rolul diferit al acestor interacțiuni. Pe baza modelului elaborat a fost dată explicarea calitativă și cantitativă a dependenței susceptibilității magnetice pentru compușii  $[Co(pyterpy)_2](PF_6)_2$ ,  $[Co(pyterpy)_2](TCNQ)_2 \cdot DMF \cdot MeOH$  și  $[Co(pyterpy)_2](TCNQ)_2 \cdot MeCN \cdot MeOH$ .

A fost dezvoltată o abordare microscopică a problemei tranzițiilor de spin induse de transferul de sarcină într-un sistem de clusteri trinucleari Fe-Co-Fe în interacțiune, care ia în considerare comutarea polarizării în timpul transformării  $Fe_{ls}^{II} - Co_{ls}^{III} - Fe_{ls}^{III} \rightarrow Fe_{ls}^{III} - Co_{hs}^{II} - Fe_{ls}^{III}$  (ls – low-spin, hs – high-spin). S-a dovedit că interacțiunile cooperative electron-deformațională și dipol-dipol, precum și transferul intracluster al electronului guvernează schimbările semnificative observate în caracteristicile magnetice și de polarizare ale cristalului examinat. În cadrul tratării noi microscopice elaborate a fost dată explicarea proprietăților magnetice și celor de polarizabilitate pentru compusul  $\{[FeTp(CN)_3]_2Co(Meim)_4\} \cdot 6H_2O$  în răspuns la stimuli externi.

A fost elaborat modelul pentru descrierea transformării valent-tautomerice  $Cr^{3+}-dhsq^{3-}-Co^{3+} \rightarrow Cr^{3+}-dhubq^{2-}-hs-Co^{2+}$  în compusul  $[(Cr(SS-cth))(Co(RR-cth)(\mu-dhubq))](PF_6)_2Cl$ . A fost demonstrat că concurența dintre interacțiunile intracluster și cooperative duce la diferite tipuri tranzițiilor de spin. Parametrii caracteristici ai interacțiunilor principale care guvernează această transformare au fost evaluate prin metoda DFT. Modelul reproduce totalmente comportamentul magnetic al compusului susnumit. A fost prezentată tratarea microscopică pentru descrierea tranziției de spin induse de transferul sarcinii în complexul binuclear Fe - Co. S-a demonstrat că mecanismul, care dirijează tranziția de spin, indusă de transferul sarcinii, este interacțiunea modelelor moleculare cu fononi. Modelul explică calitativ și cantitativ datele experimentale asupra complexului  $[(Tp)Fe(CN)_3]\{Co-(PY5Me_2)\}(CF_3SO_3)$ .

Lucrarea de sinteză publicată conține descrierea modelării teoretice a tranzițiilor de spin efectuate de autori. Spre deosebire de treceri în revistă pe această tematică publicate de alți autori, această trecere în revistă este focalizată pe originea interacțiunii cooperative a clusterilor de metal în cristalele moleculare cu accent deosebit pe rolul fizic al vibrațiilor moleculare și al fononilor. A fost demonstrat că modelul propus oferă o descriere bună a crossoverului de spin observat în compușii mono-, bi- și tetranucleari, precum și tranzițiilor induse de transferul de sarcină.

A fost propusă o tratarea nouă pentru explicarea cursului transformării de spin în cristalele ce conțin ca element structural clusterii trinucleari lineari ai fierului. Este demonstrat că în dependență de puterile relative ale interacțiunilor intra- și intercluster sistemele trinucleare pot manifesta tranziții lente, tranziții în trepte și cele acompaniate de histereza. Au fost elucidate efectele presiunii externe asupra tranzițiilor în cristalele care conțin clusterii trinucleari ca element structural. Modelul elaborat a permis reproducerea calitativă și cantitativă a cursului transformării de spin în compusul  $Fe_3(bntrz)_6(tcnsset)_6$  atât sub acțiunea presiunii externe, cât și în lipsa ei.

Cursul tranziției de spin demonstrate de complexul tetranuclear  $[Co_2Fe_2(bpy^*)_4(CN)_6(tp^*)_2](PF_6)_2 \cdot 2CP \cdot 8BN$  a fost examinat prin calculele DFT ale energiilor într-un singur punct pentru diferite valori ale spinului total al complexului în intervalul larg de temperaturi. A fost demonstrat că la temperatura 100K două subunități A și B cristalografic unice prezente în structura conțin ionii diamagnetici  $Fe^{II}$  și  $Co^{III}$  cu spinul  $S=0$ . Din trei subunități A, A' și B detectate cristalografic în compusul studiat la  $T=200K$  numai subunități A conțin ionii paramagnetici  $Fe^{III}$  cu spin mic  $1/2$  și ionii  $Co^{II}$  cu spin mare  $3/2$ , în timp ce la 260K o jumătate de clusteri în cristal este în această stare. Calculele DFT de asemenea au arătat că la 320K în cristalul examinat sunt prezente numai unitățile paramagnetice. Este discutată posibilitatea de a prezice



structura și caracteristicile materialelor noi care manifestă tranziții de spin pe baza calculelor DFT ale energiilor într-un singur punct ca funcțiilor de temperatură.

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

Investigarea proprietăților fizice fundamentale ale compușilor  $AB_4X_8$  ( $A=Ga, Al, Ge$ ;  $B=V, Mo, Nb, Ta$ ;  $X=S, Se$ ) cu structura spinel lacunară și  $Me_2Mo_3O_8$  ( $Me=Mn, Fe, Co$ ) cu structura hexagonală, a permis de a evidenția particularitățile mecanismelor de ordonare magnetică, polară și multiferică ale acestor materiale. În urma experimentelor de creștere au fost obținute monocristale perfecte cu dimensiunea până la 3-4 mm, ceea ce depășește semnificativ rezultatele precedente publicate în literatură. Creșterea monocristalelor voluminoase a permis de a obține informația fiabilă despre proprietățile magnetice și dielectrice ale acestor compuși, în deosebi, despre anizotropia proprietăților fizice.

Rezultatele experimentale obținute în cadrul proiectului au permis de a clarifica originea stărilor magnetice exotice de tip skyrmion cu dimensiunea nanometrică, de ordonare (anti)polară, originea fenomenului de comutare rezistivă și a proprietăților multiferice ale compușilor  $AB_4X_8$  cu structura spinel lacunară și compușilor  $Me_2Mo_3O_8$  cu structura hexagonală. S-a demonstrat că fenomenul de remagnetizare prin starea antiferomagnetică 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. Acest fenomen unic de remagnetizare prin starea antiferomagnetică deschide o cale nouă de a dirija proprietățile magnetice și polarizarea dielectrică ale dispozitivelor spintronice la nivelul atomic.

Rezultatele obținute sunt importante atât pentru descrierea teoretică a fenomenelor fizice în materiale semiconductoare și izolatoare cu ordonarea magnetică, cât și pentru elaborarea dispozitivelor spintronice bazate pe principii noi, cu capacitatea sporită de înregistrare a informației.

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 heterojuncțiilor 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.

Modelele teoretice propuse în cadrul îndeplinirii proiectului nu numai au explicat un șir de fenomene fizice observabile asociate cu tranziții de spin în compușii solizi cu stările electronice labile, care prezintă interes încrescător pentru electronica cuantică și spintronica, dar și sunt acceptabile pentru prezicerea materialelor noi cu proprietăți avansate, care demonstrează tranziții de spin. Aceste rezultate obținute și publicate în revistele internaționale de prestigiu sunt accesibile și prezintă interes nu numai din punct de vedere științific dar și cel aplicativ. Un interes

deosebit prezintă metoda de studiu al tranzițiilor de spin pe baza calculelor DFT ale energiilor într-un singur punct care a fost propusă în cadrul îndeplinirii proiectului și dă posibilitatea de a obține un răspuns preliminar dacă materialul supus examinării poate manifesta transformarea spinului sub acțiunea stimulilor externi și oferă informația în ce interval de temperaturi se așteaptă să fie observate aceste tranziții.

Noutatea rezultatelor experimentale și teoretice obținute în cadrul proiectului, importanța lor științifică și impactul asupra cercetărilor în domeniul respectiv al fizicii solidului și științei materialelor este confirmată prin 81 articole publicate în revistele prestigioase internaționale cu factor de impact (IF), printre care sunt și revistele Nature (IF 42.8), Physical Reports (IF 25.6), Nature Communication (IF 16.6), Nanoletters (IF 11,23), Physical Review Letters (IF 9.16), Quantum materials (IF 7.03), etc.

## **6. Infrastructura de cercetare utilizată în cadrul proiectului**

- Grupul teoreticienilor dispune de 5 calculatoare personale de generația i7 cu procesoare performante și memorie extinsă pentru modelarea proprietăților magneice și spectroscopice ale magneților moleculari și mediilor dopate, De asemenea grupul dispune de un supercomputer de tipul Dell T420 cu 24 de unități de procesare pentru efectuarea calculelor DFT.
- Instalații tehnologice de sintetizare și creștere a monocristalelor prin metodele reacțiilor chimice de transport și cristalizare din flux.
- Instalații tehnologice de obținere a filmelor ultrasubțiri prin metoda CVD.
- Instalații experimentale pentru cercetarea efectelor galvanomagnetice în intervalul de temperaturi 10-300K cu achiziția datelor la calculator.
- Instalații experimentale pentru studiul proprietăților optice, fotoelectrice și luminescente (inclusiv cu rezoluție în timp) în intervalul temperaturi 10-300K și lungimi de undă 0.4 – 2  $\mu\text{m}$ , dotate cu lasere care operează în regim staționar și pulsant.
- Microscopie optice și AFM.
- Instalații cu raze X pentru determinarea structurii cristaline și compoziției chimice ale materialelor studiate.
- Cluster performant pentru efectuarea calculelor DFT.

## **7. Colaborare la nivel național/ 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

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 lentă și ineficientă a serviciilor, care asigură achiziționarea materialelor și echipamentului necesar pentru cercetarea experimentală.

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

1. **KLOKISHNER, S.**; REU, O., LI, X.; WANG, Y.; SCHLÖGL, R.; TRUNSCHKE, A. Experimental and Computational Study of the Apparent Absorption Spectra of Nanostructured Manganese Tungstate Catalysts, Theoretical and Applied Physics, The 11th International Conference on Electronics, Communications and Computing, 21-22 October, 2021, Chisinau, Republic of Moldova, 2022, p.112-117, Doi: <https://doi.org/10.52326/ic-ecco.2021/TAP.01>
2. GAO, S.; ROSALES, H.D.; GÓMEZ ALBARRACIN, 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. In: *Nature*. 2020, **586**, 37—41. Doi: [10.1038/s41586-020-2716-8](https://doi.org/10.1038/s41586-020-2716-8) (IF: 42,778).
3. BACHUS, S.; KAIB, D.A.S.; TOKIWA, Y.; JESCHE, A.; **TSURKAN, V.**; LOIDL, A.; WINTER, S.M.; TSIRLIN, A.A.; VALENTI, R.; GEGENWART, P. Thermodynamic Perspective on Field-Induced Behavior of  $\alpha$ -RuCl<sub>3</sub>. In: *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).
4. 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. In: *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).
5. **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 Rb<sub>1-x</sub>Fe<sub>1.6</sub>Se<sub>2-z</sub>S<sub>z</sub>. In: *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)
6. 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<sub>2</sub>S<sub>4</sub> up to 110 T. In: *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).
7. **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  $\text{GeV}_4\text{S}_8$ . In: *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).
  8. RESCHKE, S.; TSIRLIN, A. A.; KHAN, N.; **PRODAN, L.**; **TSURKAN, V.**; KÉZSMÁRKI, I.; AND DEISENHOFER, J. Structure, phonons, and orbital degrees of freedom in  $\text{Fe}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$ . In: *Phys Rev B*. 2020, **102**, 094307 Doi: [10.1103/PhysRevB.102.094307](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.102.094307) (IF: 3,736)
  9. 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. In: *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).
  10. 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. In: *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).
  11. 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. In: *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).
  12. STRINIC, A.; RESCHKE, S.; VASIN, K.V.; SCHMIDT, M.; LOIDL, A.; **TSURKAN, V.**; EREMIN, M.V.; DEISENHOFER, J. Magnetolectric properties and low-energy excitations of multiferroic  $\text{FeCr}_2\text{S}_4$ . In: *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)
  13. WARZANOWSKI, P.; BORGWARDT, N.; HOPFER, K.; ATTIG, J.; KOETHE, T.C.; BECKER, P.; **TSURKAN, V.**; LOIDL, A.; HERMANN, M.; VAN LOOSDRECHT, P.H.M.; GRÜNINGER, M. Multiple spin-orbit excitons and the electronic structure of  $\alpha\text{-RuCl}_3$ . In: *Phys Rev Res*. 2020, **2(4)**, 042007-1—042007-7. Doi: [10.1103/PhysRevResearch.2.042007](https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.2.042007) (IF: 4,49)
  14. SZALLER, D.; SZÁSZ, K.; BORDÁCS, S.; VIROK, J.; RÖÖM, 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  $\text{Mn}^{2+}$  ions in the honeycomb multiferroic  $\text{Mn}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$ . In: *Phys Rev B*. 2020, **102(14)**, 144410-1—144410-8. Doi: [10.1103/PhysRevB.102.144410](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.102.144410) (IF: 3,575).
  15. 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  $\text{RbFeSe}_2$ . In: *Appl Sci - Basel*. 2020, **10(20)**, 7212-1—7212-8. Doi: [10.3390/app10207212](https://doi.org/10.3390/app10207212) (IF: 2,474).
  16. CSIZI, B.; RESCHKE, S.; STRINIC, A.; **PRODAN, L.**; **TSURKAN, V.**; KÉZSMÁRKI, I.; DEISENHOFER, J. Magnetic and vibronic terahertz excitations in Zn-doped  $\text{Fe}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$ . In: *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).
  17. 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  $\text{ZnCr}_2\text{Se}_4$ . In: *Phys Rev B*. 2020, **102**, Doi: [10.1103/PhysRevB.102.184431](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.102.184431) (4,05).
  18. 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  $\text{Mo}_x\text{W}_{(1-x)}\text{Se}_2\text{S}_{2(1-y)}$ . In: *IEEE Sensors Journal*, Doi: [10.1109/JSEN.2020.3012876](https://doi.org/10.1109/JSEN.2020.3012876). (IF:3,780).
19. **OSTROVSKY, S.M.; KLOKISHNER, S.I.** Modeling of Electron Transfer in a Linear Trinuclear Fe–Co–Fe Complex: Magnetic and Polarizability Properties. In: *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.; Haasee, W. Magneto-optical study of the zero-field splitting in a mononuclear tetrahedrally coordinated Co(II) compound with a mixed ligand surrounding. In: *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. In: *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  $\text{GaV}_4\text{S}_8$  and  $\text{GaV}_4\text{Se}_8$ . In: *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  $\text{MoS}_2$  Nanoparticles and Characterization of the Latter. In: *Surf Eng Appl Elect*. 2020, **56(2)**, 127—132. Doi: [10.3103/S1068375520020118](https://doi.org/10.3103/S1068375520020118) (IF: 0.243).
  24. **TSURKAN, V.**; KRUG VON NIDDA, H.-A.; DEISENHOFER, J.; LUNKENHEIMER, P.; LOIDL, A. On the complexity of spinels: Magnetic, electronic, and polar ground states. In: *Phys Rep*. 2021, **926**, 1—86. Doi: [10.1016/j.physrep.2021.04.002](https://doi.org/10.1016/j.physrep.2021.04.002) (IF: 25,600).
  25. GHARA, S.; GEIRHOS, K.; KUERTEN, L.; LUNKENHEIMER, P.; **TSURKAN, V.**; FIEBIG, M.; KÉZSMÁRKI, I. Giant conductivity of mobile non-oxide domain walls. In: *Nat Commun*. 2021, **12**, 3975-1—3975-8. Doi: [10.1038/s41467-021-24160-2](https://doi.org/10.1038/s41467-021-24160-2) (IF: 12,121).
  26. YIM, CH.M.; PANJA, S.N.; TRAINER, CH.; TOPPING, C.; HEIL, CH.; GIBBS, A.S.; MAGDYSYUK, O.V.; **TSURKAN, V.**; LOIDL, A.; ROST, A.W.; WAHL, P. Strain-Stabilized ( $\pi$ ,  $\pi$ ) Order at the Surface of  $\text{Fe}_{1+x}\text{Te}$ . In: *Nano Lett*. 2021, **21(7)**, 2786—2792. Doi: [10.1021/acs.nanolett.0c04821](https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.0c04821) (IF: 11,238).
  27. TRAINER, C.; YIM, C.M.; HEIL, C.; FARRAR, L.S.; **TSURKAN, V.**; LOIDL, A.; WAHL, P. Probing magnetic exchange interactions with helium. In: *Phys Rev Lett*. 2021, **127(16)**, 166803. Doi: [10.1103/PhysRevLett.127.166803](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.127.166803) (IF: 9,161).
  28. GEIRHOS, K.; LANGMANN, J.; **PRODAN, L.**; TSIRLIN, A.A.; MISSIUL, A.; EICKERLING, G.; JESCHE, A.; **TSURKAN, V.**; LUNKENHEIMER, P.; SCHERER, W.; KÉZSMÁRKI, I. Cooperative Cluster Jahn-Teller Effect as a Possible Route to Antiferroelectricity. In: *Phys Rev Lett*. 2021, **126(18)**, 187601. Doi: [10.1103/PhysRevLett.126.187601](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.126.187601) (IF: 8,385).
  29. RESCHKE, S.; FARKAS, D. G.; STRINIC, A.; GHARA, S.; KAUR, G.; ZAHARKO, O.; **PRODAN, L.**; **TSURKAN, V.**; SZALLER, D.; BORDACS, S.; DEISENHOFER, J.; AND KÉZSMÁRKI, I. Confirming the trilinear form of the optical magnetoelectric effect in the polar honeycomb antiferromagnet  $\text{Co}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$ . In: *NPJ Quantum Materials*, accepted (IF 6.562).
  30. Y. WANG, S. RAHMAN, E. SUN, C. KNILL, D. ZHANG, L. WANG, **V. TSURKAN**, AND I. KÉZSMÁRKI. From semiconducting to metallic: Jahn-Teller-induced phase transformation in skyrmion host  $\text{GaV}_4\text{S}_8$ . In: *J. Phys. Chem. C*. 2021 **125**, 5771–5780. <https://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcc.0c10527> (IF 4,126).
  31. **PRODAN, L.**; YASIN, S.; JESCHE, A.; DEISENHOFER, J.; KRUG VON NIDDA, H.-A.; MAYR, F.; ZHERLITSYN, S.; WOSNITZA, J.; LOIDL, A.; **TSURKAN, V.** Unusual field-induced spin reorientation in  $\text{FeCr}_2\text{S}_4$ : Field tuning of the Jahn-Teller state. In: *Phys Rev B*. 2021, **104(2)**, L020410. Doi: [10.1103/PhysRevB.104.L020410](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.104.L020410) (IF: 4,036).
  32. SUMALAN, R.; HALIP, L.; MAFFEI, M.; CROITOR, L.; **SIMINEL, A.V.**; RADULOV, I.; SUMALAN, R.M.; CRISAN, M.E. Bioprospecting Fluorescent Plant Growth Regulators from Arabidopsis to Vegetable Crops. In: *Int J Mol Sci*. 2021, **22(6)**, 2797-1—2797-16. Doi: [10.3390/ijms22062797](https://doi.org/10.3390/ijms22062797) (IF: 4,556).

33. **KLOKISHNER, S.; REU, O.; ROMAN, M.** Valence Tautomeric Transformation in the [CrCo] Compound: Exploration of Cooperative Interactions. In: *Phys Chem Chem Phys*. 2021, **23(38)**, 21714—21728. Doi: [10.1039/D1CP03209G](https://doi.org/10.1039/D1CP03209G) (IF: 3,676).
34. MELNIC, E.; KRAVTSOV, V.CH.; LUCENTI, E.; CARIATI, E.; FORNI, A.; **SIMINEL, N.**; FONARI, M.S. Regulation of  $\pi \cdots \pi$  stacking interactions between triimidazole luminophores and comprehensive emission quenching by coordination to Cu(II). In: *New J Chem*. 2021, **45(20)**, 9040—9052. Doi: [10.1039/d1nj00909e](https://doi.org/10.1039/d1nj00909e) (IF: 3,288).
35. YAMAMOTO, SH.; SUWA, H.; KIHARA, T.; NOMURA, T.; KOTANI, Y.; NAKAMURA, T.; SKOURSKI, Y.; ZHERLITSYN, S.; **PRODAN, L.**; **TSURKAN, V.**; NOJIRI, H.; LOIDL, A.; WOSNITZA, J. Element-specific field-induced spin reorientation and tetracritical point in MnCr<sub>2</sub>S<sub>4</sub>. In: *Phys Rev B*. 2021, **103(2)**, L020408. Doi: [10.1103/PhysRevB.103.L020408](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.103.L020408) (IF: 3,575).
36. BACHUS, S.; KAIB, D.A.S.; JESCHE, A.; **TSURKAN, V.**; LOIDL, A.; WINTER, S.M.; TSIRLIN, A.A.; VALENTÍ, R.; GEGENWART, P. Angle-dependent thermodynamics of  $\alpha$ -RuCl<sub>3</sub>. In: *Phys Rev B*. 2021, **103(5)**, 0544404. Doi: [10.1103/PhysRevB.103.054440](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.103.054440) (IF: 3,575).
37. TRAINER, C.; SONGVILAY, M.; QURESHI, N.; STUNAU, A.; YIM, C.M.; RODRIGUEZ, E.E.; HEIL, C.; **TSURKAN, V.**; GREEN, M.A.; LOIDL, A.; WAHL, P.; STOCK, C. Magnetic surface reconstruction in the van der Waals antiferromagnet Fe<sub>1+x</sub>Te. In: *Phys Rev B*. 2021, **103(2)**, 024406. Doi: [10.1103/PhysRevB.103.024406](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.103.024406) (IF: 3,575).
38. NEVINSKAS, I.; NORKUS, R.; GEIÁ<sup>3</sup>UTIS, A.; **KULYUK, L.**; **MIKU, A.**; SUSHKEVICH, K.; KROTKUS, A. Terahertz pulse emission from photoexcited bulk crystals of transition metal dichalcogenides. In: *J Phys D Appl Phys*. 2021, **54(11)**, 115105. Doi: [10.1088/1361-6463/abcc26](https://doi.org/10.1088/1361-6463/abcc26) (IF: 3,169).
39. 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<sub>x</sub>W<sub>(1-x)</sub>Se<sub>2y</sub>S<sub>2(1-y)</sub>. In: *IEEE Sens J*. 2021, **21(1)**, 325—330. Doi: [10.1109/JSEN.2020.3012876](https://doi.org/10.1109/JSEN.2020.3012876) (IF: 3,073).
40. HE, G.; PEIS, L.; STUMBERGER, R.; **PRODAN, L.**; **TSURKAN, V.**; UNGLERT, N.; CHIONCEL, L.; KÉZSMÁRKI, I.; HACKL, R. Phonon anomalies associated with spin reorientation in the Kagome ferromagnet Fe<sub>3</sub>Sn<sub>2</sub>. In: *Phys. Status Solidi B*. 2021, 2100169. Doi: [10.1002/pssb.202100169](https://doi.org/10.1002/pssb.202100169) (IF 2.821).
41. LOIDL, A.; LUNKENHEIMER, P.; **TSURKAN, V.** On the proximate Kitaev quantum-spin liquid  $\alpha$ -RuCl<sub>3</sub>: thermodynamics, excitations and continua. In: *J Phys-Condens Mat*. 2021, **33(44)**, 443004-1—443004-23. Doi: [10.1088/1361-648X/ac1bcf](https://doi.org/10.1088/1361-648X/ac1bcf) (IF: 2,333).
42. **KLOKISHNER, S.**; **OSTROVSKY, S.** Modeling of electron transfer phenomenon in the dinuclear {Fe( $\mu$ -CN)Co} complexes. In: *J Appl Phys*. 2021, **129(11)**, 113901-1—113901-10. Doi: [10.1063/5.0041952](https://doi.org/10.1063/5.0041952) (IF: 2,286).
43. **OSTROVSKY, S.** Magnetostructural study of four-coordinated Co(II) complexes with mixed ligand surrounding. In: *Polyhedron*. 2021, **194**, 114936-1—114936-6. Doi: [10.1016/j.poly.2020.114936](https://doi.org/10.1016/j.poly.2020.114936) (IF: 2,343).
44. GOROBET, A.; CRISAN, M.E.; BOUROSH, P.N.; **SIMINEL, A.V.**; CROITOR, L. Supramolecular architectures and photoluminescent properties of triethanolammonium 4-nitrobenzoate salt and its Ni(II) complexes. In: *Polyhedron*. 2021, **193**, 114893. Doi: [10.1016/j.poly.2020.114893](https://doi.org/10.1016/j.poly.2020.114893) (IF: 2,343).
45. FANFARILLO, L.; KOPIC, D.; STERZI, A.; MANZONI, G.; CREPALDI, A.; PAYNE, D.T.; BRONSCH, W.; **TSURKAN, V.**; **CROITORI, D.**; DEISENHOFER, J.; PARMIGIANI, F.; CAPONE, M.; CILENTO, F. Photoinduced long-lived state in FeSe<sub>0.4</sub>Te<sub>0.6</sub>. In: *J Electron Spectros Relat Phenom*. 2021, **250**, 147090-1—147090-7. Doi: [10.1016/j.elspec.2021.147090](https://doi.org/10.1016/j.elspec.2021.147090) (IF: 1,468).
46. NOMURA, T.; HAUSPURG, A.; GORBUNOV, D.I.; MIYATA, A.; SCHULZE, E.; ZVYAGIN, S.A.; **TSURKAN, V.**; MATSUDA, Y.H.; KOHAMA, Y.; ZHERLITSYN, S. Ultrasound measurement technique for the single-turn-coil magnets. In: *Rev Sci Instrum*. 2021, **92(6)**, 063902-1—63902. Doi: [10.1063/5.0045209](https://doi.org/10.1063/5.0045209) (IF: 1,480).

47. **Nazarov, M.** Artificial Luminescence from the Coral Surface: Study of a  $\text{SrAl}_2\text{O}_4:\text{Eu}^{2+}, \text{Dy}^{3+}$ -Based Phosphor. In: *J Surf Invest.* 2021, **15(5)**, 1102—1108. Doi: [10.1134/S1027451021050360](https://doi.org/10.1134/S1027451021050360). (IF: 0,58).
48. WINKLER, M.; PRODAN, L.; **TSURKAN, V.**; LUNKENHEIMER, P.; KEZSMARKI, I. Antipolar transitions in  $\text{GaNb}_4\text{Se}_8$  and  $\text{GaTa}_4\text{Se}_8$ . In: *Phys Rev B.* 2022, **106(11)**, 115146. Doi: [10.1103/PhysRevB.106.115146](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.106.115146) (IF: 4.036).
49. PUNTIGAM, L.; ALTHALER, M.; GHARA, S.; PRODAN, L.; **TSURKAN, V.**; KROHNS, S.; KÉZSMÁRKI, I.; EVANS, D.M. Strain Driven Conducting Domain Walls in a Mott Insulator. In: *Adv Electron Mater.* 2022, **8(10)**, 2200366-1—2200366-8. Doi: [10.1002/aelm.202200366](https://doi.org/10.1002/aelm.202200366) (IF: 7,633).
50. SCHILBERTH, F.; UNGLERT, N.; PRODAN, L.; MEGGLE, F.; EBAD ALLAH, J.; KUNTSCHER, C.A.; TSIRLIN, A.A.; **TSURKAN, V.**; DEISENHOFER, J.; CHIONCEL, L.; KÉZSMÁRKI, I.; BORDÁCS, S. Magneto-optical detection of topological contributions to the anomalous Hall effect in a kagome ferromagnet. In: *Phys Rev B.* 2022, **106(14)**, 144404. Doi: [10.1103/PhysRevB.106.144404](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.106.144404) (IF: 4.036).
51. WAGNER, J.; SAHASRABUDHE, A.; VERSTEEG, R.; WYSOCKI, L.; WANG, ZH.; **TSURKAN, V.**; LOIDL, A.; HEDAYAT, H.; VAN LOOSDRECHT, P.H.M. Nonequilibrium dynamics of  $\alpha\text{-RuCl}_3$  – a time-resolved magneto-optical spectroscopy study. In: *Faraday Discuss.* 2022, **237**, 237—258. Doi: [10.1039/D2FD00006G](https://doi.org/10.1039/D2FD00006G) (IF: 4,394).
52. CULEAC, I.P.; VERLAN, V.I.; BORDIAN, O.T.; ZUBAREVA, V.E.; IOVU, M.S.; BULHAC, I.I.; **SIMINEL, N.A.**; **SIMINEL, A.V.**; MIHAI, G.; ENACHESCU, M. Synthesis and Characterization of Coordination Compound  $[\text{Eu}(\mu_2\text{-OC}_2\text{H}_5)(\text{btfa})(\text{NO}_3)(\text{phen})]_2\text{phen}$  with High Luminescence Efficiency. In: *Nanomaterials.* 2022, **12(16)**, 2788-1—2788-14. Doi: [10.3390/nano12162788](https://doi.org/10.3390/nano12162788) (IF: 5,719).
53. **SIMINEL, N.**; GALKIN, K.N.; ARUSHANOV, E.; GALKIN, N.G. Photoconductivity study of  $\text{Ca}_2\text{Si}$  epitaxial film on  $\text{Si}(111)$  substrate. In: *Vacuum.* 2022, **203**, 111302. Doi: [10.1016/j.vacuum.2022.111302](https://doi.org/10.1016/j.vacuum.2022.111302) (IF: 3,627).
54. VERSTEEG, R.B.; CHIOCCHETTA, A.; SEKIGUCHI, F.; SAHASRABUDHE, A.; WAGNER, J.; ALDEA, A.I.R.; BUDZINAUSKAS, K.; WANG, ZH.; **TSURKAN, V.**; LOIDL, A.; KHOMSKII, D.I.; DIEHL, S.; VAN LOOSDRECHT, P.H.M. Nonequilibrium quasistationary spin disordered state in  $\alpha\text{-RuCl}_3$ . In: *Phys Rev B.* 2022, **105(22)**, 224428. Doi: [10.1103/PhysRevB.105.224428](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.105.224428) (IF: 4,036).
55. WAGNER, J.; SAHASRABUDHE, A.; VERSTEEG, R.B.; WYSOCKI, L.; WANG, ZH.; **TSURKAN, V.**; LOIDL, A.; KHOMSKII, D.I.; HEDAYAT, H.; VAN LOOSDRECHT, P.H.M. Magneto-optical study of metamagnetic transitions in the antiferromagnetic phase of  $\alpha\text{-RuCl}_3$ . In: *npj Quantum Materials.* 2022, **7**, 28-1—28-10. Doi: [10.1038/s41535-022-00434-w](https://doi.org/10.1038/s41535-022-00434-w) (IF: 7,032).
56. SEKIGUCHI, F.; BUDZINAUSKAS, K.; PADMANABHAN, P.; VERSTEEG, R.B.; **TSURKAN, V.**; KEZSMARKI, I.; FOGGETTI, F.; ARTYUKHIN, S.; VAN LOOSDRECHT, P.H.M. Slowdown of photoexcited spin dynamics in the non-collinear spin-ordered phases in skyrmion host  $\text{GaV}_4\text{S}_8$ . In: *Nat Commun.* 2022, **13**, 3212-1—3212-8. Doi: [10.1038/s41467-022-30829-z](https://doi.org/10.1038/s41467-022-30829-z) (IF: 14,919).
57. ROSALES, H.D.; GÓMEZ ALBARRACÍN, F.A.; GURATINDER, K.; **TSURKAN, V.**; **PRODAN, L.**; RESSOUCHE, E.; ZAHARKO, O. Anisotropy-driven response of the fractional antiferromagnetic skyrmion lattice in  $\text{MnSc}_2\text{S}_4$  to applied magnetic fields. In: *Phys Rev B.* 2022, **105(22)**, 224402-1—224402-7. Doi: [10.1103/PhysRevB.105.224402](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.105.224402) (IF: 4.036).
58. EVANS, D.M.; GRENDAL, O.G.; **PRODAN, L.**; WINKLER, M.; WINTERHALTER-STOCKER, N.; GEGENWART, P.; GHARA, S.; DEISENHOFER, J.; KÉZSMÁRKI, I.; **TSURKAN, V.** Resolving structural changes and symmetry lowering in spinel  $\text{FeCr}_2\text{S}_4$ . In: *Phys Rev B.* 2022, **105(17)**, 174107-1—174107-7. Doi: [10.1103/PhysRevB.105.174107](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.105.174107) (IF: 4,036).
59. GURATINDER, K.; **TSURKAN, V.**; **PRODAN, L.**; KELLER, L.; EMBS, J.P.; JURANYI, F.; MEDARDE, M.; RÜEGG, CH.; ZAHARKO, O. Magnetic order and exchange couplings in the

- frustrated diamond lattice antiferromagnet  $\text{MnSc}_2\text{Se}_4$ . In: *Phys Rev B*. 2022, **105**(17), 174423. Doi: [10.1103/PhysRevB.105.174423](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.105.174423) (IF: 4,036).
60. KIIAMOV, A.; KUZNETSOV, M.; **CROITORI, D.**; **FILIPPOVA, I.**; **TSURKAN, V.**; KRUG VON NIDDA, H.-A.; SEIDOV, Z.; MAYR, F.; WIDMANN, S.; VAGIZOV, F.; TAYURSKII, D.; TAGIROV, L. Density Functional Theory Approach to the Vibrational Properties and Magnetic Specific Heat of the Covalent Chain Antiferromagnet  $\text{KFeS}_2$ . In: *Molecules*. 2022, **27**(9), 2663-1—2663-16. Doi: [10.3390/molecules27092663](https://doi.org/10.3390/molecules27092663) (IF: 4,411).
  61. KIIAMOV, A.; SEIDOV, Z.; **CROITORI, D.**; **TSURKAN, V.**; KRUG VON NIDDA, H.-A.; GÜNTHER, A.; TAGIROV, L.; TAYURSKII, D. Magnetic and vibrational properties of the covalent chain antiferromagnet  $\text{RbFeS}_2$ . In: *J Phys Conf Ser*. 2022, **2164**, 012026-1—012026-4. Doi: [10.1088/1742-6596/2164/1/012026](https://doi.org/10.1088/1742-6596/2164/1/012026) (0,48) .
  62. LOZOVAN, V.; KRAVTSOV, V.CH.; COSTRIUCOVA, N.V.; **SIMINEL, A.**; **KULIKOVA, O.V.**; FONARI, M.S. Tunability in dimension, metal and ligand coordination modes and emission properties in  $\text{Cd(II)}$  and  $\text{Zn(II)}$  coordination networks based on 4,4'-(hydrazine-1,2-diyilidenebis(methanylylidene)) dibenzoic acid linker. In: *J Solid State Chem*. 2022, **310**, 123021-1—123021-9. Doi: [10.1016/j.jssc.2022.123021](https://doi.org/10.1016/j.jssc.2022.123021) (IF: 3,498).
  63. PETERSEN, T.; **PRODAN, L.**; **TSURKAN, V.**; KRUG VON NIDDA, H.-A.; KÉZSMÁRKI, I.; RÖBLER, U.K.; HOZOL, L. How Correlations and Spin–Orbit Coupling Work within Extended Orbitals of Transition-Metal Tetrahedra of 4d/5d Lacunar Spinel. In: *J Phys Chem Lett*. 2022, **13**(7), 1681—1686. Doi:[10.1021/acs.jpcclett.1c04100](https://doi.org/10.1021/acs.jpcclett.1c04100) (IF: 6,475).
  64. **KLOKISHNER, S.**; **OSTROVSKY, S.**; PALII, A.; TSUKERBLAT, B. Cooperative Spin Transitions Triggered by Phonons in Metal Complexes Coupled to Molecular Vibrations. In: *Magnetochemistry*. 2022, **8**(2), 24-1—24-13. Doi: [10.3390/magnetochemistry8020024](https://doi.org/10.3390/magnetochemistry8020024) (IF: 2,193).
  65. PRINZ-ZWICK, M.; GIMPEL, T.; GEIRHOS, K.; GHARA, S.; STEINBRECHT, C.; **TSURKAN, V.**; BÜTTGEN, N.; KÉZSMÁRKI I. Probing multiferroic order parameters and domain population via nuclear spins. In: *Phys Rev B*. 2022, **105**(1), 014301. Doi: [10.1103/PhysRevB.105.014301](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.105.014301) (IF: 4,036).
  66. RESCHKE, S.; FARKAS, D. G.; STRINIC, A.; GHARA, S.; GURATINDER, K.; ZAHARKO, O.; **PRODAN, L.**; **TSURKAN, V.**; SZALLER, D.; BORDACS, S.; DEISENHOFER, J.; KÉZSMÁRKI, I. Confirming the trilinear form of the optical magnetoelectric effect in the polar honeycomb antiferromagnet  $\text{Co}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$ . In: *npj Quantum Materials*. 2022, **7**, 1-1—1-7. Doi: [10.1038/s41535-021-00417-3](https://doi.org/10.1038/s41535-021-00417-3) (IF: 7,032).
  67. CRISAN, M.; PETRIC, M.; VLASE, G.; VLASE, T.; **SIMINEL, A.V.**; BOUROSH, P.N.; CROITOR, L. Organic salt versus salt cocrystal: thermal behavior, structural and photoluminescence investigations. In: *J Therm Anal Calorim*. 2022, **147**(2), 1203—1213. Doi: [10.1007/s10973-020-10438-y](https://doi.org/10.1007/s10973-020-10438-y) (IF: 4,626).
  68. **PRODAN, L.**; **FILIPPOVA, I.**; ZUBTSOVSKII, A.O.; SHOVA, S.; WIDMANN, S.; TSIRLIN, A.A.; KÉZSMÁRKI, I.; **TSURKAN, V.** Dilution of a polar magnet: Structure and magnetism of  $\text{Zn}$ -substituted  $\text{Co}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$ . In: *Physical Review B*. 2022,**106**, 174421. (IF: 4,036).
  69. **OSTROVSKY, S.**; **KLOKISHNER, S.** Modeling of Spin Crossover in Linear Trinuclear Complexes: Effects of External Pressure. In: *J Phys Chem A*. 2022, **126**(44), 8348—8357. Doi: [10.1021/acs.jpca.2c04820](https://doi.org/10.1021/acs.jpca.2c04820). (IF: 2,944).
  70. DANILESCU, O.; BOUROSH, P.; **KULIKOVA O.V.**; CHUMAKOV, YU.M.; BULHAC, I.; CROITOR, L. Dihydrazone Schiff base ligands – Appropriate chemosensors fo  $\text{Cd(II)}$  detection. In: *Inorganic Chemistry Communications*. 2022, **146**, 110199 [Doi: 10.1016/j.inoche.2022.110199](https://doi.org/10.1016/j.inoche.2022.110199) (IF: 3,428)



71. **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. In: *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).
72. GHARA, S.; VASIN, K.; KAMENSKYI, D.; PRODAN, L.; **TSURKAN, V.**; KÉZSMÁRKI, I.; DEISENHOFER, J. Magnetization reversal through an antiferromagnetic state. In: *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).
73. 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. In: *Physica B*. 2023, **666**, 415137. Doi: [10.1016/j.physb.2023.415137](https://doi.org/10.1016/j.physb.2023.415137) (IF: 2,8).
74. 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. In: *Phys Rev B*. 2023, **108(4)**, 0456103. Doi: [10.1103/PhysRevB.108.045103](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.108.045103) (IF: 3,908).
75. **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. In: *Appl Phys Lett*. 2023, **123(2)**, 021901-1—021901-6. Doi: [10.1063/5.0155295](https://doi.org/10.1063/5.0155295) (IF: 4).
76. 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>. In: *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).
77. 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. In: *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).
78. **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. In: *Opt Mater Express*. 2023, **13(4)**, 886—891. Doi: [10.1364/OME.482929](https://doi.org/10.1364/OME.482929) (IF: 3,074).
79. **PAVLENKO, V.**; BELOUSSOV, I. Amplified spontaneous emission from CdSe/CdS/CdZnS quantum dot films. In: *J Lumin*. 2023, **257**, 119643. Doi: [10.1016/j.jlumin.2022.119643](https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2022.119643) (IF: 4,171).
80. 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>. In: *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).
81. **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. In: *Opt Mater*. 2023, **145**, 114377. Doi: [10.1016/j.optmat.2023.114377](https://doi.org/10.1016/j.optmat.2023.114377) (IF: 3,9).

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

*Lista forurilor la care au fost prezentate rezultatele obținute în cadrul proiectului de stat*

➤ Manifestări științifice internaționale (în străinătate)

1. Siminel, N.; Aazou, S.; Guc, M.; Micu, A.; Siminel, A.; Sekkat, Z.; Kulyuk, L. Bound excitons radiative recombination and Raman scattering in layered MoSe<sub>2</sub> crystals intercalated with I<sub>2</sub> molecules. Physics Conference TIM-20-21, West University of Timisoara, România, 11-13 November, 2021. **Oral report**
2. Lukas Puntigam, Donald Evans, Markus Althaler, Somnath Ghara, Lilian Prodan, Vladimir Tsurkan, Stephan Krohns, and Istvan Kezsmarki. Strain driven conducting domain walls in a mott insulator, the DPG Spring Meeting, Regensburg, Germany, September 2022. **Oral report.**
3. Elaheh Sadrollahi, Jochen Litterst, Lilian Prodan, Vladimir Tsurkan, and Alois Loidl. Spin-reorientation in CuCr<sub>2</sub>S<sub>4</sub> from MUSR, The DPG Spring Meeting, Regensburg, Germany, September 2022. **Oral report.**
4. Lilian Prodan, Vladimir Tsurkan, And István Kézsmárki. Magnetocrystalline anisotropy in easy-plane kagomé ferromagnet Fe<sub>3</sub>Sn. The DPG Spring Meeting, Regensburg, Germany, September 2022. **Oral report**
5. Maximilian Winkler, Somnath Ghara, Korbinian Geirhos, Lilian Prodan, Vladimir Tsurkan, Stephan Krohns, and Istvan Kezsmarki. Fast non-volatile electrical switching of the magnetoelectric domain states in the cubic spinel Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub>. The DPG Spring Meeting, Regensburg, Germany, September 2022. **Oral report.**
6. Kirill Vasin, Alexey Nurmukhametov, Mikhail Eremin, Anna Strinic, Lilian Prodan, Vladimir Tsurkan, István Kézsmárki, and Joachim Deisenhofer. Microscopic theory of the thz modes and their nonreciprocal directional dichroism in the antiferromagnet Fe<sub>2</sub>Mo<sub>3</sub>O<sub>8</sub> The DPG Spring Meeting, Regensburg, Germany, September 2022. **Oral report.**
7. Somnath Ghara, Evgenii Barts, Kirill Vasin, Dmytro Kamenskyi, Lilian Prodan, Vladimir Tsurkan, Maxim Mostovoy, Istvan Kezsmarki, and Joachim Deisenhofer. Magnetization reversal through an antiferromagnetic state. The DPG Spring Meeting, Regensburg, Germany, September 2022. **Oral report.**
8. Donald M Evans, Stephan Krohns, Dorina Croitori, Vladimir Tsurkan, and István Kézsmárki. Local measurements of (super-)conducting microstructure in Rb<sub>x</sub>Fe<sub>2-y</sub>Se<sub>2</sub>. The DPG Spring Meeting, Regensburg, Germany, September 2022. **Oral report.**
9. Andreas Hauspurg, S. Zherlitsyn, T. Helm, T. Yanagisawa, V. Tsurkan, and J. Wosnitza.  $\alpha$ -rucl3 probed by ultrasound under hydrostatic pressure. The DPG Spring Meeting, Regensburg, Germany, September 2022. **Oral report.**
10. Nikita Siminel, doctorand; International Physics Conference TIM 22; West University of Timisoara, Faculty of Physics, Romania, 23-25 Noiembrie 2022; Kinetics of Exciton Luminescence of Layered MoSe<sub>2</sub> and MoS<sub>2</sub> Crystals Intercalated with Halogen Molecules. **Oral report**

➤ Manifestări științifice internaționale (în Republica Moldova)

1. Klokishner, S.; Reu, O., Li, X.; Wang, Y.; Schlögl, R.; Trunschke, A., Experimental and Computational Study of the Apparent Absorption Spectra of Nanostructured Manganese Tungstate Catalysts, Theoretical and Applied Physics, The 11th International Conference on Electronics, Communications and Computing, 21-22 October, 2021, Chisinau, Republic of Moldova, 2022, p.31, (<http://repository.utm.md/handle/5014/20071>)

➤ Manifestări științifice naționale

➤ Manifestări științifice cu participare internațională

**11. Aprecieră și recunoașterea rezultatelor obținute în proiect (premiu, medalii, titluri, alte aprecieri)**

1. **Prof., dr. hab. Clochișner Sofia**; Certificate of Recognition of the American Chemical Society, 2020
2. **Dr. hab. S. Ostrovschi**, Premiul Academiei de Științe a Moldovei pentru rezultate științifice valoroase obținute în anii 2019–2020 în domeniul fizică „Vsevolod Moscalenco” pentru ciclul de lucrări „Studiul proceselor ce guvernează comportamentul compușilor care conțin ioni de Co, ce pot fi utilizați în electronica moleculară”. 2021
3. **Prof., dr. hab. S. Clochișner**, Diploma de onoare a Guvernului Republicii Moldova pentru activitate produgioasă și contribuție substanțială la dezvoltarea științei, promovarea rezultatelor remarcabile în domeniul cercetării și inovării, precum și cu prilejul Zilei Internaționale a Femeilor și Fetelor din domeniul Științei. 2021
4. **Prof., dr. hab. Clochișner Sofia**; Medalia „Promotor al Culturii calității în educație și cercetare” Gradul II, Nr.28-A din 04.04.2023
5. **Dr. Roman Marianna**, Diploma Ministerului Educației, Culturii și Cercetării al Republicii Moldova (cu prilejul Zilei Internaționale a Femeilor și Fetelor din domeniul Științei), 2020.
6. **Dr. Roman Marianna**, Certificat de apreciere ANCD (cu prilejul Zilei Internaționale a Femeilor și Fetelor din domeniul Științei), 2022
7. **Dr. Dorina Croitori**, Diploma de onoare în semn de recunoștință și apreciere a activității în domeniile cercetării și inovării, și cu prilejul zilei profesionale a lucrătorilor din sfera științei și inovării- „Ziua Științei” 2023.
8. **Dr. hab S. Ostrovschi** Diploma Meritul Academic, pentru realizarea cercetărilor științifice fundamentale și aplicate în domeniul fizicii, contribuții substanțiale la dezvoltarea managementului domeniilor cercetării și inovării.
9. Articolul: **Klokishner, S.; Reu, O.; Roman, M.** Valence Tautomeric Transformation in the [CrCo] Compound: Exploration of Cooperative Interactions. *Phys Chem Chem Phys*. 2021, **23(38)**, 21714-21728. Doi: [10.1039/D1CP03209G](https://doi.org/10.1039/D1CP03209G) (IF: 3,676) a fost recunoscut ca unul din cele mai bune articole publicate în revista internațională *Phys Chem Chem Phys* în anul 2021.

## 12. Promovarea rezultatelor cercetărilor obținute în proiect în mass-media

- Emisiuni radio/TV de popularizare a științei
- Articole de popularizare a științei

1. **Prof., dr. hab. S. Clochisner**, Articolul “SOFIA CLOCHIȘNER: ... am știut cu certitudine că vreau să fiu cercetătoare...” în ziarul “Univers Pedagogic pro”, Nr.10 (752), 11 martie 2021, A intervievat Irina ODOBESCU, reporteră UPP
2. **Nazarov, M.V.** Ultraviolet LEDs and their applications. *Fizica și Tehnologiile Moderne*. 2021, **73-74(1-2)**, 18—30.
3. **Culiuc, L.** Amintiri și reflecții despre academicianul Sergiu Rădăuțanu. În cartea: "Sergiu Rădăuțanu. Biobibliografie: (vocație, exigență, rațiune)", 17 iunie 2021, Chișinău, Universitatea Tehnică a Moldovei, p. 32—37. ISBN: 978-9975-87-818-0.
4. **Culiuc, L.; Hajdeu-Chicarosh, E.** Sub semnul energiei creatoare. Academicianul Ernest ARUȘANOV la 80 de ani. In: *Revista de știință, inovare, cultură și artă "Akademos"*. 2021, **60(1)**, 171—172

## 13. Teze de doctorat / postdoctorat susținute și confirmate pe parcursul anilor 2020-2023 de membrii echipei proiectului

1. **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

## 14. Materializarea rezultatelor obținute în proiect (cu specificarea aplicării în practică)

Forme de materializare a rezultatelor cercetării în cadrul proiectului pot fi produse, utilaje și servicii noi, documente ale autorităților publice aprobate etc.

## 15. Informație suplimentară referitor la activitățile membrilor echipei

- Membru/președinte al comitetului organizatoric/științific, al comisiilor, consiliilor științifice de susținere a tezelor
1. **Prof. Clochisner Sofia**, membru Comisiei de Experți în matematică, știința informației și științe fizice a ANACEC. 2020-2023, membru consiliului științific la susținerea tezei de doctor a Dnei Elena Melnic 2022; Președintele Consiliului Științific la susținerea tezei de doctor a Dlui Sergiu Bîzgan 2022.
  2. **Acad. Culiuc Leonid**, Vice-președintele Comisiei de Experți în matematică, știința informației și științe fizice a ANACEC; Președintele Comisiei de evaluare, clasificare și monitorizare a revistelor a ANACEC.

3. **Dr. hab Ostrovschi Serghei**, Secretar Științific al comisiei de doctorat pentru susținerea tezei de doctor a d-nei Alexandra Mîrzac 2022.
4. **Dr. Filippova Irina**, membru consiliului științific specializat D 133.04-22-9 la susținerea tezei de doctor a Dnei Elena Melnic

➤ Redactor / membru al colegiilor de redacție al revistelor naționale / internaționale

1. **Dr. Kulikova Olga**, prenume / «Збірник наукових праць Кам'янець-Подільського національного університету» DOI: <https://doi.org/10.32626/2307-4507.2021-27> / [membru](#)/ Membru al comitetului de redacție al revistei internaționale

## 16. Recomandări, propuneri.

## 17. Concluzii

Conducătorul de proiect

CULIUC Leonid



Data: 03.01.2024

LȘ

## Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în proiect perioada 2020-2023

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

**Cifrul proiectului: 20.80009.5007.19**

A fost elaborată tehnologia de creștere și obținute monocristale perfecte ale compușilor  $\text{GaV}_4\text{S}_8$ ,  $\text{GaV}_4\text{Se}_8$ ,  $\text{GaNb}_4\text{S}_8$ ,  $\text{AlV}_4\text{S}_8$ ,  $\text{GaTa}_4\text{Se}_8$ ,  $\text{GaV}_4\text{S}_8$  dopate cu Ge cu structura spinel lacunară și ale compușilor multiferoici  $\text{Co}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$ ,  $\text{Fe}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$ ,  $\text{Mn}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$  și  $\text{Fe}_{1.86}\text{Zn}_{0.14}\text{Mo}_3\text{O}_8$  cu structura hexagonală. Cercetările proprietăților structurale, termodinamice, dielectrice și magnetice efectuate în intervalul de temperaturi 2 - 400 K și câmpuri magnetice până la 5 T au depistat în aceste cristale tranziții structurale și magnetice. În compușii  $\text{GaNb}_4\text{S}_8$  și  $\text{GaTa}_4\text{Se}_8$  a fost evidențiate tranzițiile magnetice respectiv la temperatura 32 și 52 K cu scăderea bruscă a susceptibilității, datorată formării stării de tip spin-singlet. În compusul  $\text{Co}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$  a fost evidențiată anizotropia substanțială a susceptibilității magnetice de-a lungul și perpendicular axei *c*. În compusul  $\text{Fe}_{1.86}\text{Zn}_{0.14}\text{Mo}_3\text{O}_8$  a fost demonstrată schimbarea stării magnetice de bază de la antiferomagnetică la ferimagnetică. 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. Rezultatele obținute au permis de a clarifica mecanismele de ordonare polară și proprietățile multiferoice ale acestor materiale fiind importante atât pentru descrierea teoretică a fenomenelor fizice în materiale semiconductoare și izolatoare cu ordonarea magnetică, cât și pentru elaborarea dispozitivelor spintronice bazate pe principii noi, cu capacitatea sporită de înregistrare a informației.

Au fost crescute monocristale stratificate de dicalcogenizi ai metalelor de tranziție DMT dopate cu crom, vanadiu și intercalate cu molecule de halogen. A fost stabilit, că structura spectrelor de luminescență ale excitonilor legați de moleculele  $\text{Br}_2$ , adsorbite pe suprafața unui monostrat de  $\text{WS}_2$  diferă de cea a spectrelor excitonilor legați de moleculele, incorporate în interstițiul van der Waals al cristalelor. Prin calculele DFT, a fost identificată poziționarea spațială a halogenului adsorbit. Au fost cercetate spectrele de emisie a excitonilor legați în cristalele  $\text{WS}_2:\text{Br}_2$  și  $\text{MoS}_2:\text{Cl}_2$ ,  $\text{I}_2$  în câmpuri magnetice intense și determinate g-factorul și structura fină a spectrului excitonic. Au fost stabilite condițiile tehnologice de obținere a cristalelor DMT, care asigură concentrația optimală a moleculelor de halogen încorporate în rețeaua cristalină a DMT. S-a demonstrat, că structura benzii fononice a spectrelor de luminescență a cristalelor  $\text{MoSe}_2:\text{I}_2$  este formată de 2 moduri vibraționale, unul din ele fiind modul local indus de molecula de iod. Au fost examinate posibilitățile fundamentale de modificare a proprietăților electronice ale heterojuncțiunilor van der Waals prin intercalarea moleculelor de halogen în interfața joncțiunii.

A fost efectuată modelarea teoretică a proprietăților magnetice și spectroscopice pentru un șir de sisteme moleculare care demonstrează tranziții de spin sub acțiunea stimulilor externi. În explicațiile calitative și cantitative oferite ale efectului crossoverului de spin în compușii  $[\text{Co}(\text{pyterpy})_2](\text{PF}_6)_2$ ,  $[\text{Co}(\text{pyterpy})_2](\text{TCNQ})_2 \cdot \text{DMF} \cdot \text{MeOH}$  și  $[\text{Co}(\text{pyterpy})_2](\text{TCNQ})_2 \cdot \text{MeCN} \cdot \text{MeOH}$  se ține cont că cooperativitatea în aceste cristale este asigurată de cuplajul cooperativ electron-deformațional și cel Jahn-Teller. Revelația mecanismelor responsabile pentru transferul electronului de tip metal-metal și ligand-metal în compușii  $\{[\text{FeTp}(\text{CN})_3]_2\text{Co}(\text{Meim})_4\} \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ,  $\{[\text{TpFe}(\text{CN})_3]\text{Co}(\text{PY5Me}_2)\}(\text{CF}_3\text{SO}_3)$  și  $[(\text{Cr}(\text{SS-cth}))(\text{Co}(\text{RR-cth})(\mu\text{-dnhq}))(\text{PF}_6)_2\text{Cl}]$  și calculele DFT ale unor parametri microscopici ai modelului nou propus a permis reproducerea teoretică a caracteristicilor magnetice ale compușilor. Cursul tranziției de spin manifestat de complexul tetranuclear  $[\text{Co}_2\text{Fe}_2(\text{bpy}^*)_4(\text{CN})_6(\text{tp}^*)_2](\text{PF}_6)_2 \cdot 2\text{CP} \cdot 8\text{BN}$  a fost explicat prin calculele DFT ale energiilor într-un singur punct pentru diferite valori ale spinului total al complexului într-un interval larg de temperaturi.

The technology of the single-crystal growth was developed and the perfect single crystals of compounds  $\text{GaV}_4\text{S}_8$ ,  $\text{GaV}_4\text{Se}_8$ ,  $\text{GaNb}_4\text{S}_8$ ,  $\text{AlV}_4\text{S}_8$ ,  $\text{GaTa}_4\text{Se}_8$ , and  $\text{GaV}_4\text{S}_8$  doped with Ge with lacunar spinel structure and of multiferroics compounds  $\text{Co}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$ ,  $\text{Fe}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$ ,  $\text{Mn}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$ , and  $\text{Fe}_{1.86}\text{Zn}_{0.14}\text{Mo}_3\text{O}_8$  with hexagonal structure have been obtained. Investigation of their basic structural, thermodynamics, dielectric, and magnetic properties performed in the range of temperatures 2 - 400 K and magnetic fields up to 5 T revealed the structural and magnetic transitions. For  $\text{GaNb}_4\text{S}_8$  and  $\text{GaTa}_4\text{Se}_8$  the magnetic transitions, respectively at 32 K and 52 K were observed with a significant decrease in the susceptibility due to formation of the spin-singlet state. A substantial anisotropy of the magnetic susceptibility along and perpendicular to the c-axis was revealed in the multiferroics  $\text{Co}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$ . In  $\text{Fe}_{1.86}\text{Zn}_{0.14}\text{Mo}_3\text{O}_8$  a change the magnetic ground state from the antiferromagnetic to ferromagnetic was demonstrated. A novel phenomena of magnetization reversal through the antiferromagnetic state was evidenced that offers a new way for magnetization and polarization control at the atomic level in spintronics devices. The obtained results allow to clarify the mechanisms of polar ordering and the multiferroic properties of these materials being important both for the theoretical description of physical phenomena in semiconductor and insulating materials with magnetic ordering and for the elaboration of spintronic devices on new principles with enhanced registration capacity.

Lamellar single crystals of Transition Metals Dichalcogenides (TMD -  $\text{MoS}_2$ ,  $\text{MoSe}_2$  and  $\text{WSe}_2$ ) doped with chromium and vanadium and intercalated by chlorine ( $\text{MoS}_2:\text{Cl}_2$ ) and iodine ( $\text{MoSe}_2:\text{I}_2$ ,  $\text{WSe}_2:\text{I}_2$ ) molecules were grown. It was established that the luminescence of the exciton bound to halogen adsorbed on the surface of a 2D monoatomic layer of  $\text{WS}_2$  exhibits a different spectral distribution than the luminescence of excitons bound to the same molecules incorporated in the van der Waals cavities of bulk  $\text{WS}_2$  samples. By performing theoretical DFT calculations, the peculiarities of the energy spectrum induced by halogen molecules on the surface of  $\text{WS}_2:\text{Br}_2$  monolayers were revealed and the spatial positioning of the adsorbed halogen was identified. The evolution of emission spectra of bound excitons in  $\text{WS}_2:\text{Br}_2$  and  $\text{MoS}_2:\text{Cl}_2$ ,  $\text{I}_2$  crystals in intense magnetic fields (up to 30T) was investigated. Based on Zeeman data analysis, the g-factor and fine structure of the exciton spectrum were determined and the "dark" and "bright" states were identified.

Optimal technological conditions for obtaining TMD single crystals were established. This ensured the maximum concentration of halogen molecules incorporated in the TMD crystal lattice. It was shown, that the phonon band structure of the luminescence spectra of  $\text{MoSe}_2:\text{I}_2$  crystals consists of 2 vibrational modes, one of them ( $\nu_{\text{ph1}}=190 \text{ cm}^{-1}$ ) being 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.

Theoretical modeling of magnetic and spectroscopic properties has been performed for a number of molecular systems which demonstrate spin transitions under the action of external stimuli. The provided qualitative and quantitative explanation of the spin crossover effect in the  $[\text{Co}(\text{pyterpy})_2](\text{PF}_6)_2$ ,  $[\text{Co}(\text{pyterpy})_2](\text{TCNQ})_2 \cdot \text{DMF} \cdot \text{MeOH}$  and  $[\text{Co}(\text{pyterpy})_2](\text{TCNQ})_2 \cdot \text{MeCN} \cdot \text{MeOH}$  compounds takes into account that the cooperativity in these crystals is ensured by the cooperative electron-deformational and Jahn-Teller couplings. The revelation of the mechanisms responsible for the metal-metal and ligand-metal electron transfer in the compounds  $\{[\text{FeTp}(\text{CN})_3]_2\text{Co}(\text{Meim})_4\} \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ ,  $\{[(\text{Tp})\text{Fe}(\text{CN})_3]\}[\text{Co}(\text{PY5Me}_2)](\text{CF}_3\text{SO}_3)$ ,  $[(\text{Cr}(\text{SS-cth}))(\text{Co}(\text{RR-cth})(\mu\text{-dhibq}))](\text{PF}_6)_2\text{Cl}$  and the DFT calculations of some microscopic parameters of the newly proposed model allowed the theoretical reproduction of the magnetic characteristics of these compounds. The course of the spin transformation demonstrated by the tetranuclear complex  $[\text{Co}_2\text{Fe}_2(\text{bpy}^*)_4(\text{CN})_6(\text{tp}^*)_2](\text{PF}_6)_2 \cdot 2\text{CP} \cdot 8\text{BN}$  was followed by DFT calculations of the single point energies for different values of the total spin of the complex over the wide temperature range.

**Lista lucrărilor științifice, științifico-metodice și didactice  
publicate pentru anii 2020-2023 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. Capitle 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. GAO, S.; ROSALES, H.D.; GÓMEZ ALBARRACIN, 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. In: *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  $\alpha$ -RuCl<sub>3</sub>. In: *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. In: *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 Rb<sub>1-x</sub>Fe<sub>1.6</sub>Se<sub>2-z</sub>S<sub>z</sub>. In: *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<sub>2</sub>S<sub>4</sub> up to 110 T. In: *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<sub>4</sub>S<sub>8</sub>. In: *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  $\text{Fe}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$ . In: *Phys Rev B*. 2020, **102**, 094307 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. In: *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. In: *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. In: *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  $\text{FeCr}_2\text{S}_4$ . In: *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.; HERMANN, M.; VAN LOOSDRECHT, P.H.M.; GRÜNINGER, M. Multiple spin-orbit excitons and the electronic structure of  $\alpha\text{-RuCl}_3$ . In: *Phys Rev Res*. 2020, **2(4)**, 042007-1—042007-7. Doi: [10.1103/PhysRevResearch.2.042007](https://doi.org/10.1103/PhysRevResearch.2.042007) (IF: 4,49)
  13. SZALLER, D.; SZÁSZ, K.; BORDÁCS, S.; VIROK, J.; RÖÖM, 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  $\text{Mn}^{2+}$  ions in the honeycomb multiferroic  $\text{Mn}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$ . In: *Phys Rev B*. 2020, **102(14)**, 144410-1—144410-8. Doi: [10.1103/PhysRevB.102.144410](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.102.144410) (IF: 3,575).
  14. KHAMOV, 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  $\text{RbFeSe}_2$ . In: *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  $\text{Fe}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$ . In: *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  $\text{ZnCr}_2\text{Se}_4$ . In: *Phys Rev B*. 2020, **102**, Doi: [10.1103/PhysRevB.102.184431](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.102.184431) (4,05).
  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  $\text{Mo}_x\text{W}_{(1-x)}\text{Se}_2\text{S}_{2(1-y)}$ . In: *IEEE Sensors Journal*, Doi: [10.1109/JSEN.2020.3012876](https://doi.org/10.1109/JSEN.2020.3012876) (IF:3,780).
  18. **OSTROVSKY, S.M.**; **KLOKISHNER, S.I.** Modeling of Electron Transfer in a Linear Trinuclear Fe–Co–Fe Complex: Magnetic and Polarizability Properties. In: *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).
  19. **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. In: *Polyhedron*. 2020, **187**, 114630. Doi: [10.1016/j.poly.2020.114630](https://doi.org/10.1016/j.poly.2020.114630) (IF: 2,284).
20. **KLOKISHNER, S.; OSTROVSKY, S.M.** Interplay of Jahn-Teller Ordering and Spin Crossover in Co(II) Compounds. In: *Magnetochemistry*. 2020, **6(4)**, 62-1—62-11. Doi: 10.3390/magnetochemistry6040062 (IF: 1,947).
  21. 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 GaV<sub>4</sub>S<sub>8</sub> and GaV<sub>4</sub>Se<sub>8</sub>. In: *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).
  22. **LASCOVA-BACIU, R.** Hydrothermal and Electrochemical Synthesis of MoS<sub>2</sub> Nanoparticles and Characterization of the Latter. In: *Surf Eng Appl Elect*. 2020, **56(2)**, 127—132. Doi: [10.3103/S1068375520020118](https://doi.org/10.3103/S1068375520020118) (IF: 0.243).
  23. **TSURKAN, V.**; KRUG VON NIDDA, H.-A.; DEISENHOFER, J.; LUNKENHEIMER, P.; LOIDL, A. On the complexity of spinels: Magnetic, electronic, and polar ground states. In: *Phys Rep*. 2021, **926**, 1—86. Doi: [10.1016/j.physrep.2021.04.002](https://doi.org/10.1016/j.physrep.2021.04.002) (IF: 25,600).
  24. GHARA, S.; GEIRHOS, K.; KUERTEN, L.; LUNKENHEIMER, P.; **TSURKAN, V.**; FIEBIG, M.; KÉZSMÁRKI, I. Giant conductivity of mobile non-oxide domain walls. In: *Nat Commun*. 2021, **12**, 3975-1—3975-8. Doi: [10.1038/s41467-021-24160-2](https://doi.org/10.1038/s41467-021-24160-2) (IF: 12,121).
  25. YIM, CH.M.; PANJA, S.N.; TRAINER, CH.; TOPPING, C.; HEIL, CH.; GIBBS, A.S.; MAGDYSYUK, O.V.; **TSURKAN, V.**; LOIDL, A.; ROST, A.W.; WAHL, P. Strain-Stabilized ( $\pi$ ,  $\pi$ ) Order at the Surface of Fe<sub>1+x</sub>Te. In: *Nano Lett*. 2021, **21(7)**, 2786—2792. Doi: [10.1021/acs.nanolett.0c04821](https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.0c04821) (IF: 11,238).
  26. TRAINER, C.; YIM, C.M.; HEIL, C.; FARRAR, L.S.; **TSURKAN, V.**; LOIDL, A.; WAHL, P. Probing magnetic exchange interactions with helium. In: *Phys Rev Lett*. 2021, **127(16)**, 166803. Doi: [10.1103/PhysRevLett.127.166803](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.127.166803) (IF: 9,161).
  27. GEIRHOS, K.; LANGMANN, J.; **PRODAN, L.**; TSIRLIN, A.A.; MISSIUL, A.; EICKERLING, G.; JESCHE, A.; **TSURKAN, V.**; LUNKENHEIMER, P.; SCHERER, W.; KÉZSMÁRKI, I. Cooperative Cluster Jahn-Teller Effect as a Possible Route to Antiferroelectricity. In: *Phys Rev Lett*. 2021, **126(18)**, 187601. Doi: [10.1103/PhysRevLett.126.187601](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.126.187601) (IF: 8,385).
  28. RESCHKE, S.; FARKAS, D. G.; STRINIC, A.; GHARA, S.; KAUR, G.; ZAHARKO, O.; **PRODAN, L.**; **TSURKAN, V.**; SZALLER, D.; BORDACS, S.; DEISENHOFER, J.; AND KÉZSMÁRKI, I. Confirming the trilinear form of the optical magnetoelectric effect in the polar honeycomb antiferromagnet Co<sub>2</sub>Mo<sub>3</sub>O<sub>8</sub>. In: *NPJ Quantum Materials*, accepted (IF 6.562).
  29. Y. WANG, S. RAHMAN, E. SUN, C. KNILL, D. ZHANG, L. WANG, **V. TSURKAN**, AND I. KÉZSMÁRKI. From semiconducting to metallic: Jahn-Teller-induced phase transformation in skyrmion host GaV<sub>4</sub>S<sub>8</sub>. In: *J. Phys. Chem. C*. 2021 **125**, 5771—5780. <https://dx.doi.org/10.1021/acs.jpcc.0c10527> (IF 4,126).
  30. **PRODAN, L.**; YASIN, S.; JESCHE, A.; DEISENHOFER, J.; KRUG VON NIDDA, H.-A.; MAYR, F.; ZHERLITSYN, S.; WOSNITZA, J.; LOIDL, A.; **TSURKAN, V.** Unusual field-induced spin reorientation in FeCr<sub>2</sub>S<sub>4</sub>: Field tuning of the Jahn-Teller state. In: *Phys Rev B*. 2021, **104(2)**, L020410. Doi: [10.1103/PhysRevB.104.L020410](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.104.L020410) (IF: 4,036).
  31. SUMALAN, R.; HALIP, L.; MAFFEI, M.; CROITOR, L.; **SIMINEL, A.V.**; RADULOV, I.; SUMALAN, R.M.; CRISAN, M.E. Bioprospecting Fluorescent Plant Growth Regulators from Arabidopsis to Vegetable Crops. In: *Int J Mol Sci*. 2021, **22(6)**, 2797-1—2797-16. Doi: [10.3390/ijms22062797](https://doi.org/10.3390/ijms22062797) (IF: 4,556).
  32. **KLOKISHNER, S.; REU, O.; ROMAN, M.** Valence Tautomeric Transformation in the [CrCo] Compound: Exploration of Cooperative Interactions. In: *Phys Chem Chem Phys*. 2021, **23(38)**, 21714—21728. Doi: [10.1039/D1CP03209G](https://doi.org/10.1039/D1CP03209G) (IF: 3,676).
  33. MELNIC, E.; KRAVTSOV, V.CH.; LUCENTI, E.; CARIATI, E.; FORNI, A.; **SIMINEL, N.**; FONARI, M.S. Regulation of  $\pi \cdots \pi$  stacking interactions between triimidazole luminophores and comprehensive emission quenching by coordination to Cu(II). In: *New J Chem*. 2021, **45(20)**, 9040—9052. Doi: [10.1039/d1nj00909e](https://doi.org/10.1039/d1nj00909e) (IF: 3,288).

34. YAMAMOTO, SH.; SUWA, H.; KIHARA, T.; NOMURA, T.; KOTANI, Y.; NAKAMURA, T.; SKOURSKI, Y.; ZHERLITSYN, S.; **PRODAN, L.**; **TSURKAN, V.**; NOJIRI, H.; LOIDL, A.; WOSNITZA, J. Element-specific field-induced spin reorientation and tetracritical point in  $\text{MnCr}_2\text{S}_4$ . In: *Phys Rev B*. 2021, **103(2)**, L020408. Doi: [10.1103/PhysRevB.103.L020408](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.103.L020408) (IF: 3,575).
35. BACHUS, S.; KAIB, D.A.S.; JESCHE, A.; **TSURKAN, V.**; LOIDL, A.; WINTER, S.M.; TSIRLIN, A.A.; VALENTÍ, R.; GEGENWART, P. Angle-dependent thermodynamics of  $\alpha$ - $\text{RuCl}_3$ . In: *Phys Rev B*. 2021, **103(5)**, 0544404. Doi: [10.1103/PhysRevB.103.0544404](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.103.0544404) (IF: 3,575).
36. TRAINER, C.; SONGVILAY, M.; QURESHI, N.; STUNAU, A.; YIM, C.M.; RODRIGUEZ, E.E.; HEIL, C.; **TSURKAN, V.**; GREEN, M.A.; LOIDL, A.; WAHL, P.; STOCK, C. Magnetic surface reconstruction in the van der Waals antiferromagnet  $\text{Fe}_{1+x}\text{Te}$ . In: *Phys Rev B*. 2021, **103(2)**, 024406. Doi: [10.1103/PhysRevB.103.024406](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.103.024406) (IF: 3,575).
37. NEVINSKAS, I.; NORKUS, R.; GEIÅ<sup>3/4</sup>UTIS, A.; **KULYUK, L.**; **MIKU, A.**; SUSHKEVICH, K.; KROTKUS, A. Terahertz pulse emission from photoexcited bulk crystals of transition metal dichalcogenides. In: *J Phys D Appl Phys*. 2021, **54(11)**, 115105. Doi: [10.1088/1361-6463/abcc26](https://doi.org/10.1088/1361-6463/abcc26) (IF: 3,169).
38. 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  $\text{Mo}_x\text{W}_{(1-x)}\text{Se}_2\text{S}_{2(1-y)}$ . In: *IEEE Sens J*. 2021, **21(1)**, 325—330. Doi: [10.1109/JSEN.2020.3012876](https://doi.org/10.1109/JSEN.2020.3012876) (IF: 3,073).
39. HE, G.; PEIS, L.; STUMBERGER, R.; **PRODAN, L.**; **TSURKAN, V.**; UNGLERT, N.; CHIONCEL, L.; KÉZSMÁRKI, I.; HACKL, R. Phonon anomalies associated with spin reorientation in the Kagome ferromagnet  $\text{Fe}_3\text{Sn}_2$ . In: *Phys. Status Solidi B*. 2021, 2100169. Doi: [10.1002/pssb.202100169](https://doi.org/10.1002/pssb.202100169) (IF 2.821).
40. LOIDL, A.; LUNKENHEIMER, P.; **TSURKAN, V.** On the proximate Kitaev quantum-spin liquid  $\alpha$ - $\text{RuCl}_3$ : thermodynamics, excitations and continua. In: *J Phys-Condens Mat*. 2021, **33(44)**, 443004-1—443004-23. Doi: [10.1088/1361-648X/ac1bcf](https://doi.org/10.1088/1361-648X/ac1bcf) (IF: 2,333).
41. **KLOKISHNER, S.**; **OSTROVSKY, S.** Modeling of electron transfer phenomenon in the dinuclear  $\{\text{Fe}(\mu\text{-CN})\text{Co}\}$  complexes. In: *J Appl Phys*. 2021, **129(11)**, 113901-1—113901-10. Doi: [10.1063/5.0041952](https://doi.org/10.1063/5.0041952) (IF: 2,286).
42. **OSTROVSKY, S.** Magnetostructural study of four-coordinated Co(II) complexes with mixed ligand surrounding. In: *Polyhedron*. 2021, **194**, 114936-1—114936-6. Doi: [10.1016/j.poly.2020.114936](https://doi.org/10.1016/j.poly.2020.114936) (IF: 2,343).
43. GOROBET, A.; CRISAN, M.E.; BOUROSH, P.N.; **SIMINEL, A.V.**; CROITOR, L. Supramolecular architectures and photoluminescent properties of triethanolammonium 4-nitrobenzoate salt and its Ni(II) complexes. In: *Polyhedron*. 2021, **193**, 114893. Doi: [10.1016/j.poly.2020.114893](https://doi.org/10.1016/j.poly.2020.114893) (IF: 2,343).
44. FANFARILLO, L.; KOPIC, D.; STERZI, A.; MANZONI, G.; CREPALDI, A.; PAYNE, D.T.; BRONSCH, W.; **TSURKAN, V.**; **CROITORI, D.**; DEISENHOFER, J.; PARMIGIANI, F.; CAPONE, M.; CILENTO, F. Photoinduced long-lived state in  $\text{FeSe}_{0.4}\text{Te}_{0.6}$ . In: *J Electron Spectros Relat Phenom*. 2021, **250**, 147090-1—147090-7. Doi: [10.1016/j.elspec.2021.147090](https://doi.org/10.1016/j.elspec.2021.147090) (IF: 1,468).
45. NOMURA, T.; HAUSPURG, A.; GORBUNOV, D.I.; MIYATA, A.; SCHULZE, E.; ZVYAGIN, S.A.; **TSURKAN, V.**; MATSUDA, Y.H.; KOHAMA, Y.; ZHERLITSYN, S. Ultrasound measurement technique for the single-turn-coil magnets. In: *Rev Sci Instrum*. 2021, **92(6)**, 063902-1—63902. Doi: [10.1063/5.0045209](https://doi.org/10.1063/5.0045209) (IF: 1,480).
46. **Nazarov, M.** Artificial Luminescence from the Coral Surface: Study of a  $\text{SrAl}_2\text{O}_4:\text{Eu}^{2+}, \text{Dy}^{3+}$ -Based Phosphor. In: *J Surf Invest*. 2021, **15(5)**, 1102—1108. Doi: [10.1134/S1027451021050360](https://doi.org/10.1134/S1027451021050360). (IF: 0,58).
47. WINKLER, M.; PRODAN, L.; **TSURKAN, V.**; LUNKENHEIMER, P.; KEZSMARKI, I. Antipolar transitions in  $\text{GaNb}_4\text{Se}_8$  and  $\text{GaTa}_4\text{Se}_8$ . In: *Phys Rev B*. 2022, **106(11)**, 115146. Doi: [10.1103/PhysRevB.106.115146](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.106.115146) (IF: 4.036).

48. PUNTIGAM, L.; ALTTHALER, M.; GHARA, S.; PRODAN, L.; **TSURKAN, V.**; KROHNS, S.; KÉZSMÁRKI, I.; EVANS, D.M. Strain Driven Conducting Domain Walls in a Mott Insulator. In: *Adv Electron Mater.* 2022, **8(10)**, 2200366-1—2200366-8. Doi: [10.1002/aelm.202200366](https://doi.org/10.1002/aelm.202200366) (IF: 7,633).
49. SCHILBERTH, F.; UNGLERT, N.; PRODAN, L.; MEGGLE, F.; EBAD ALLAH, J.; KUNTSCHER, C.A.; TSIRLIN, A.A.; **TSURKAN, V.**; DEISENHOFER, J.; CHIONCEL, L.; KÉZSMÁRKI, I.; BORDÁCS, S. Magneto-optical detection of topological contributions to the anomalous Hall effect in a kagome ferromagnet. In: *Phys Rev B.* 2022, **106(14)**, 144404. Doi: [10.1103/PhysRevB.106.144404](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.106.144404) (IF: 4.036).
50. WAGNER, J.; SAHASRABUDHE, A.; VERSTEEG, R.; WYSOCKI, L.; WANG, ZH.; **TSURKAN, V.**; LOIDL, A.; HEDAYAT, H.; VAN LOOSDRECHT, P.H.M. Nonequilibrium dynamics of  $\alpha$ -RuCl<sub>3</sub> – a time-resolved magneto-optical spectroscopy study. In: *Faraday Discuss.* 2022, **237**, 237—258. Doi: [10.1039/D2FD00006G](https://doi.org/10.1039/D2FD00006G) (IF: 4,394).
51. CULEAC, I.P.; VERLAN, V.I.; BORDIAN, O.T.; ZUBAREVA, V.E.; IOVU, M.S.; BULHAC, I.I.; **SIMINEL, N.A.**; **SIMINEL, A.V.**; MIHAI, G.; ENACHESCU, M. Synthesis and Characterization of Coordination Compound [Eu( $\mu_2$ -OC<sub>2</sub>H<sub>5</sub>)(btfa)(NO<sub>3</sub>)(phen)]<sub>2</sub>phen with High Luminescence Efficiency. In: *Nanomaterials.* 2022, **12(16)**, 2788-1—2788-14. Doi: [10.3390/nano12162788](https://doi.org/10.3390/nano12162788) (IF: 5,719).
52. **SIMINEL, N.**; GALKIN, K.N.; ARUSHANOV, E.; GALKIN, N.G. Photoconductivity study of Ca<sub>2</sub>Si epitaxial film on Si(111) substrate. In: *Vacuum.* 2022, **203**, 111302. Doi: [10.1016/j.vacuum.2022.111302](https://doi.org/10.1016/j.vacuum.2022.111302) (IF: 3,627).
53. VERSTEEG, R.B.; CHIOCCETTA, A.; SEKIGUCHI, F.; SAHASRABUDHE, A.; WAGNER, J.; ALDEA, A.I.R.; BUDZINAUSKAS, K.; WANG, ZH.; **TSURKAN, V.**; LOIDL, A.; KHOMSKII, D.I.; DIEHL, S.; VAN LOOSDRECHT, P.H.M. Nonequilibrium quasistationary spin disordered state in  $\alpha$ -RuCl<sub>3</sub>. In: *Phys Rev B.* 2022, **105(22)**, 224428. Doi: [10.1103/PhysRevB.105.224428](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.105.224428) (IF: 4,036).
54. WAGNER, J.; SAHASRABUDHE, A.; VERSTEEG, R.B.; WYSOCKI, L.; WANG, ZH.; **TSURKAN, V.**; LOIDL, A.; KHOMSKII, D.I.; HEDAYAT, H.; VAN LOOSDRECHT, P.H.M. Magneto-optical study of metamagnetic transitions in the antiferromagnetic phase of  $\alpha$ -RuCl<sub>3</sub>. In: *npj Quantum Materials.* 2022, **7**, 28-1—28-10. Doi: [10.1038/s41535-022-00434-w](https://doi.org/10.1038/s41535-022-00434-w) (IF: 7,032).
55. SEKIGUCHI, F.; BUDZINAUSKAS, K.; PADMANABHAN, P.; VERSTEEG, R.B.; **TSURKAN, V.**; KEZSMARKI, I.; FOGGETTI, F.; ARTYUKHIN, S.; VAN LOOSDRECHT, P.H.M. Slowdown of photoexcited spin dynamics in the non-collinear spin-ordered phases in skyrmion host GaV<sub>4</sub>S<sub>8</sub>. In: *Nat Commun.* 2022, **13**, 3212-1—3212-8. Doi: [10.1038/s41467-022-30829-z](https://doi.org/10.1038/s41467-022-30829-z) (IF: 14,919).
56. ROSALES, H.D.; GÓMEZ ALBARRACÍN, F.A.; GURATINDER, K.; **TSURKAN, V.**; **PRODAN, L.**; RESSOUCHE, E.; ZAHARKO, O. Anisotropy-driven response of the fractional antiferromagnetic skyrmion lattice in MnSc<sub>2</sub>S<sub>4</sub> to applied magnetic fields. In: *Phys Rev B.* 2022, **105(22)**, 224402-1—224402-7. Doi: [10.1103/PhysRevB.105.224402](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.105.224402) (IF: 4,036).
57. EVANS, D.M.; GRENDALE, O.G.; **PRODAN, L.**; WINKLER, M.; WINTERHALTER-STOCKER, N.; GEGENWART, P.; GHARA, S.; DEISENHOFER, J.; KÉZSMÁRKI, I.; **TSURKAN, V.** Resolving structural changes and symmetry lowering in spinel FeCr<sub>2</sub>S<sub>4</sub>. In: *Phys Rev B.* 2022, **105(17)**, 174107-1—174107-7. Doi: [10.1103/PhysRevB.105.174107](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.105.174107) (IF: 4,036).
58. GURATINDER, K.; **TSURKAN, V.**; **PRODAN, L.**; KELLER, L.; EMBS, J.P.; JURANYI, F.; MEDARDE, M.; RÜEGG, CH.; ZAHARKO, O. Magnetic order and exchange couplings in the frustrated diamond lattice antiferromagnet MnSc<sub>2</sub>Se<sub>4</sub>. In: *Phys Rev B.* 2022, **105(17)**, 174423. Doi: [10.1103/PhysRevB.105.174423](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.105.174423) (IF: 4,036).
59. KHAMOV, A.; KUZNETSOV, M.; **CROITORI, D.**; **FILIPPOVA, I.**; **TSURKAN, V.**; KRUG VON NIDDA, H.-A.; SEIDOV, Z.; MAYR, F.; WIDMANN, S.; VAGIZOV, F.; TAYURSKII, D.; TAGIROV, L. Density Functional Theory Approach to the Vibrational Properties and

- Magnetic Specific Heat of the Covalent Chain Antiferromagnet  $\text{KFeS}_2$ . In: *Molecules*. 2022, **27**(9), 2663-1—2663-16. Doi: [10.3390/molecules27092663](https://doi.org/10.3390/molecules27092663) (IF: 4,411).
60. KHAMOV, A.; SEIDOV, Z.; **CROITORI, D.**; **TSURKAN, V.**; KRUG VON NIDDA, H.-A.; GÜNTHER, A.; TAGIROV, L.; TAYURSKII, D. Magnetic and vibrational properties of the covalent chain antiferromagnet  $\text{RbFeS}_2$ . In: *J Phys Conf Ser*. 2022, **2164**, 012026-1—012026-4. Doi: [10.1088/1742-6596/2164/1/012026](https://doi.org/10.1088/1742-6596/2164/1/012026) (0,48).
  61. LOZOVAN, V.; KRAVTSOV, V.CH.; COSTRIUCOVA, N.V.; **SIMINEL, A.**; **KULIKOVA, O.V.**; FONARI, M.S. Tunability in dimension, metal and ligand coordination modes and emission properties in Cd(II) and Zn(II) coordination networks based on 4,4'-(hydrazine-1,2-diylidenebis(methanylylidene)) dibenzoic acid linker. In: *J Solid State Chem*. 2022, **310**, 123021-1—123021-9. Doi: [10.1016/j.jssc.2022.123021](https://doi.org/10.1016/j.jssc.2022.123021) (IF: 3,498).
  62. PETERSEN, T.; **PRODAN, L.**; **TSURKAN, V.**; KRUG VON NIDDA, H.-A.; KÉZSMÁRKI, I.; RÖBLER, U.K.; HOZOI, L. How Correlations and Spin–Orbit Coupling Work within Extended Orbitals of Transition-Metal Tetrahedra of 4d/5d Lacunar Spinels. In: *J Phys Chem Lett*. 2022, **13**(7), 1681—1686. Doi: [10.1021/acs.jpcllett.1c04100](https://doi.org/10.1021/acs.jpcllett.1c04100) (IF: 6,475).
  63. **KLOKISHNER, S.**; **OSTROVSKY, S.**; PALII, A.; TSUKERBLAT, B. Cooperative Spin Transitions Triggered by Phonons in Metal Complexes Coupled to Molecular Vibrations. In: *Magnetochemistry*. 2022, **8**(2), 24-1—24-13. Doi: [10.3390/magnetochemistry8020024](https://doi.org/10.3390/magnetochemistry8020024) (IF: 2,193).
  64. PRINZ-ZWICK, M.; GIMPEL, T.; GEIRHOS, K.; GHARA, S.; STEINBRECHT, C.; **TSURKAN, V.**; BÜTTGEN, N.; KÉZSMÁRKI, I. Probing multiferroic order parameters and domain population via nuclear spins. In: *Phys Rev B*. 2022, **105**(1), 014301. Doi: [10.1103/PhysRevB.105.014301](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.105.014301) (IF: 4,036).
  65. RESCHKE, S.; FARKAS, D. G.; STRINIC, A.; GHARA, S.; GURATINDER, K.; ZAHARKO, O.; **PRODAN, L.**; **TSURKAN, V.**; SZALLER, D.; BORDACS, S.; DEISENHOFER, J.; KÉZSMÁRKI, I. Confirming the trilinear form of the optical magnetoelectric effect in the polar honeycomb antiferromagnet  $\text{Co}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$ . In: *npj Quantum Materials*. 2022, **7**, 1-1—1-7. Doi: [10.1038/s41535-021-00417-3](https://doi.org/10.1038/s41535-021-00417-3) (IF: 7,032).
  66. CRISAN, M.; PETRIC, M.; VLASE, G.; VLASE, T.; **SIMINEL, A.V.**; BOUROSH, P.N.; CROITOR, L. Organic salt versus salt cocrystal: thermal behavior, structural and photoluminescence investigations. In: *J Therm Anal Calorim*. 2022, **147**(2), 1203—1213. Doi: [10.1007/s10973-020-10438-y](https://doi.org/10.1007/s10973-020-10438-y) (IF: 4,626).
  67. **PRODAN, L.**; **FILIPPOVA, I.**; ZUBTSOVSKII, A.O.; SHOVA, S.; WIDMANN, S.; TSIRLIN, A.A.; KÉZSMÁRKI, I.; **TSURKAN, V.** Dilution of a polar magnet: Structure and magnetism of Zn-substituted  $\text{Co}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$ . In: *Physical Review B*. 2022, **106**, 174421. (IF: 4,036).
  68. **OSTROVSKY, S.**; **KLOKISHNER, S.** Modeling of Spin Crossover in Linear Trinuclear Complexes: Effects of External Pressure. In: *J Phys Chem A*. 2022, **126**(44), 8348—8357. Doi: [10.1021/acs.jpca.2c04820](https://doi.org/10.1021/acs.jpca.2c04820). (IF: 2,944).
  69. DANILESCU, O.; BOUROSH, P.; **KULIKOVA O.V.**; CHUMAKOV, YU.M.; BULHAC, I.; CROITOR, L. Dihydrazone Schiff base ligands – Appropriate chemosensors fo Cd(II) detection. In: *Inorganic Chemistry Communications*. 2022, **146**, 110199 Doi: [10.1016/j.inoche.2022.110199](https://doi.org/10.1016/j.inoche.2022.110199) (IF: 3,428)
  70. **REU, O.**; **OSTROVSKY, S.**; **KLOKISHNER, S.** Modeling of the Charge-Transfer-Induced Spin Transition in the Tetranuclear Cyanide-Bridged  $[\text{Co}_2\text{Fe}_2]$  Complex. In: *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).
  71. GHARA, S.; VASIN, K.; KAMENSKYI, D.; **PRODAN, L.**; **TSURKAN, V.**; KÉZSMÁRKI, I.; DEISENHOFER, J. Magnetization reversal through an antiferromagnetic state. In: *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).
  72. 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. In: *Physica B*. 2023, **666**, 415137. Doi: [10.1016/j.physb.2023.415137](https://doi.org/10.1016/j.physb.2023.415137) (IF: 2,8).

73. 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. In: *Phys Rev B*. 2023, **108(4)**, 0456103. Doi: [10.1103/PhysRevB.108.045103](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.108.045103) (IF: 3,908).
74. **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. In: *Appl Phys Lett*. 2023, **123(2)**, 021901-1—021901-6. Doi: [10.1063/5.0155295](https://doi.org/10.1063/5.0155295) (IF: 4).
75. 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>. In: *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).
76. 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. In: *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).
77. **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. In: *Opt Mater Express*. 2023, **13(4)**, 886—891. Doi: [10.1364/OME.482929](https://doi.org/10.1364/OME.482929) (IF: 3,074).
78. **PAVLENKO, V.**; BELOUSSOV, I. Amplified spontaneous emission from CdSe/CdS/CdZnS quantum dot films. In: *J Lumin*. 2023, **257**, 119643. Doi: [10.1016/j.jlumin.2022.119643](https://doi.org/10.1016/j.jlumin.2022.119643) (IF: 4,171).
79. 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>. In: *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).
80. **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. In: *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

1. **NAZAROV, M.** Color Cathodoluminescence of Yttrium Tantalate Activated by Europium and Terbium. In: *J Surf Invest*. 2022, **16(5)**, 770—774. Doi: 10.1134/S1027451022050111.
2. **NAZAROV, M.** Combustion Synthesis of SrAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>:Eu<sup>2+</sup> Phosphor. Photoluminescence and Cathodoluminescence at Low Temperatures. In: *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

1. **NAZAROV, M.** SrAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub>:Eu<sup>2+</sup>, Dy<sup>3+</sup>: Synthesis, luminescence, properties, and application. In: *Moldavian Journal of the Physical Sciences*. 2020, **19(1-2)**, 59—88. Doi: [10.5281/zenodo.4118682](https://doi.org/10.5281/zenodo.4118682).
2. IOVU, M.S.; VERLAN, V.I.; CULEAC, I.P.; BORDIAN, O.; ZUBAREVA, V.E.; BULHAC, I.; ENACHESCU, M.; **SIMINEL, N.A.**; **SIMINEL, A.V.** Coordination complex [Eu(μ<sub>2</sub>-OC<sub>2</sub>H<sub>5</sub>)(btfa)(NO<sub>3</sub>)(phen)]<sub>2</sub>·1½phen with high luminescent efficiency. In: *Moldavian Journal of the Physical Sciences*. 2021, **20(1)**, 73—83. Doi: [10.53081/mjps.2021.20-1.06](https://doi.org/10.53081/mjps.2021.20-1.06).
3. **OSTROVSKY, S.**; **KLOKISHNER, S.** Tranziția de spin indusă de temperatură în complexul Co(II). In: *Revista de știință, inovare, cultură și artă "Akademos"*. 2021, **4(63)**, 32—36. Doi: 10.52673/18570461.21.4-63.03.
4. NAZAROV, M. Ultraviolet leds and their applications. In: *Fizica si tehnologiile moderne*, 2021, **19(1-2)**, 18-30.

5. **NAZAROV, M.** Zamoryanskaya, M.Z. Luminescence of yttrium tantalate doubly activated with europium and terbium under X-ray and electron beam excitations. In: *Moldavian Journal of the Physical Sciences*. 2022, **21(1)**, 18—24. Doi: 10.53081/mjps.2022.21-1.01.

#### 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)

1. **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).
2. **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)
3. **SIMINEL, N.; NEDELEA, V.; SUSHKEVICH, K.; SIMINEL, A.; MICU, A.; KULYUK, L.** Radiative Recombination of Bound Excitons in MoSe<sub>2</sub>:I<sub>2</sub> Layered Crystals. In: *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)
4. **ROMAN, M.A.; KLOKISHNER, S.I.** Modeling of the Valence Tautomeric Transformation in Heterometallic [Cr-Dhbq-Co] Molecules. In: *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)
5. **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 Eu<sup>3+</sup> Dinuclear Coordination Compound. In: *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).
6. **SIMINEL, N.; NEDELEA, V.; SUSHKEVICH, K.; SIMINEL, A.; MICU, A.; KULYUK, L.** Radiative Recombination of Bound Excitons in MoSe<sub>2</sub>:I<sub>2</sub> Layered Crystals. In: *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. **KULIKOVA, O.; DANILESCU, O.; BOUROSH, P.; CROITOR, L.** Photoluminescence and absorption of the mononuclear Cd(II) coordination compound. In: *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)

1. **KLOKISHNER, S.I.; REU, O.S.; ROMAN, M.A.** Switching of Magnetic and Polarizability Characteristics of Dinuclear [CrCo] Complexes via Intramolecular Electron Transfer. In: *The 5th International Conference on Nanotechnologies and Biomedical Engineering (ICNBME-2021)*. Abstract book, p.82.
2. **OSTROVSKY, S.M.; KLOKISHNER, S.I.** Electron Transfer Phenomenon in the Dinuclear {Fe( $\mu$ -CN)Co} Complex: Interaction of Molecular Modes with Phonons. In: *The 5th International Conference on Nanotechnologies and Biomedical Engineering (ICNBME-2021)*. Abstract book, p.83.
3. **KLOKISHNER, S.I.; REU, O.S.** Spin Crossover in Trinuclear and Protonated Tetranuclear Iron(II) Complexes: DFT Modelling. In: *The 5th International Conference on Nanotechnologies and Biomedical Engineering (ICNBME-2021)*. Abstract book, p.84
4. **KLOKISHNER, S.I.; OSTROVSKY, S.M.**, Temperature Induced Spin Transition in Co(II) Complex. In: *The 5th International Conference on Nanotechnologies and Biomedical Engineering (ICNBME-2021)*. Abstract book, p.85.

5. BORDIAN, O.; VERLAN, V.; IOVU, M.; CULEAC, I.; ZUBAREVA, V.; ENACHESCU, M.; BOJIN, D.; **SIMINEL, A.** Photoluminescence Properties of  $\text{Eu}(\text{TTA})_3(\text{Ph}_3\text{PO})_2$ . In: *ICNBME 2021, IFMBE Proceedings 87, 2022: 5th International Conference on Nanotechnologies and Biomedical Engineering*, November 3–5, 2021, Chisinau, Moldova, p. 84–91. Doi: 10.1007/978-3-030-92328-0\_12.
6. **KLOKISHNER, S.I.; REU, O.S.; ROMAN, M.A.** Switching of Magnetic and Polarizability Characteristics of Dinuclear [CrCo] Complexes via Intramolecular Electron Transfer. In: *ICNBME 2021, IFMBE Proceedings 87, 2022. 5th International Conference on Nanotechnologies and Biomedical Engineering*, November 3–5, 2021, Chisinau, Moldova, p. 263–270. Doi: 10.1007/978-3-030-92328-0\_35.
7. **Ostrovsky, S.M.; Klokishner, S.I.** Electron Transfer Phenomenon in the Dinuclear  $\{\text{Fe}(\mu\text{-CN})\text{Co}\}$  Complex: Interaction of Molecular Modes with Phonons. In: *ICNBME 2021, IFMBE Proceedings 87, 2022. 5th International Conference on Nanotechnologies and Biomedical Engineering*, November 3–5, 2021, Chisinau, Moldova, p. 271–276. Doi: 10.1007/978-3-030-92328-0\_36.
8. **Klokishner, S.I.; Reu, O.S.** Spin Crossover in Trinuclear and Protonated Tetranuclear Iron(II) Complexes: DFT Modelling. In: *ICNBME 2021, IFMBE Proceedings 87, 2022. 5th International Conference on Nanotechnologies and Biomedical Engineering*, November 3–5, 2021, Chisinau, Moldova, p. 277–283. Doi: 10.1007/978-3-030-92328-0\_37.
9. DANILESCU, O.; CROITOR, L.; BULHAC, I.; BOUROSH, P.; **KULIKOVA, O.** 2,6-diacetylpyridine dihydrazone ligands – chemosensors for  $\text{Cd}^{2+}$  detection. In: *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)

1. **PRODAN, L.; HEMMIDA, M.; KRUG VON NIDDA, H-A.; CHIONCEL, L.; TSURKAN, V.; KÉZSMARKI, I.** Magnetocrystalline Anisotropy in Ferromagnetic Fe-Sn Kagome Magnets. In: *The Joint European Magnetic Symposia (JEMS) 27th August to 1st September 2023 Spaine, Madrid, Book of Abstracts*, p.390.
2. DOERR, M. DEEB, M. GRUMBACH J., ROTTER M., **TSURKAN V., A. MIYATA, S. ZHERLITSYN, J.** Wosnitza Magnetoelastic Properties of  $\text{MnSc}_2\text{S}_4$ . In: *The Joint European Magnetic Symposia (JEMS) 27th August to 1st September 2023 Spaine, Madrid, Book of Abstracts*, p.392
3. 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. In: *IX- Salonul Internațional de Invenții și Inovații „Traian Vuia” Timoșoara, România, 15.06 - 17.06, 2023, Book of Abstracts*, p.138-139.
4. **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. In: *Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft. 2023, 3*. p. 406. ISSN: 2751-0522.
5. **PRODAN, L., FILIPPOVA, I., TSIRLIN, A., TSURKAN, V., KEZSMARKI, I.** Dilution of polar antiferromagnet  $\text{Co}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$ . In: *Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft. 2023, 3*. p. 421. ISSN: 2751-0522.
6. 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. In: *Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft. 2023, 3*. p. 452. ISSN: 2751-0522.



7.2. în lucrările conferințelor științifice internaționale (Republica Moldova)

1. 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. In: *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**

1. LOZOVAN V.; FONARI, M.; KRAVȚOV, V.; **SIMINEL, N.**; COROPCEANU, E.; **KULIKOVA, O.**; COSTRIUCOVA, N. *Polimer coordinativ unidimensional al cadmiului (II) în baza liganzilor 1,2-bis(piridin-4-ilmetilen)hidrazină și acid 2-aminobenzoic, care manifestă activitate fotoluminescentă și capacitate de schimb al moleculelor de solvent.* Brevet de Invenție nr. MD 4776 B1 2021.11.30.

## **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

## Volumul total al finanțării proiectului 2020-2023

Cifrul proiectului: 20.80009.5007.19

Anul	Finanțarea planificată (mii lei)	Finanțarea Executată (mii lei)	Cofinanțare (mii lei)
2020	2128,7	2128,7	
2021	2321,9	2321,9	
2022	2771,0	2772,0	
2023	2871,2	2951,2	
<b>Total</b>	<b>10092,8</b>	<b>10173,8</b>	

Conducătorul de proiect

CULIUC Leonida



Data: 03.01.2024

LȘ

## Componența echipei pe parcursul anilor 2020-2023

Cifrul proiectului 20.80009.5007.19

Echipa proiectului conform contractului de finanțare 2020-2023						
Nr	Nume, prenume (conform contractului de finanțare)	Anul nașterii	Titlul științific	Norma de muncă conform contractului	Data angajării	Data eliberării
1.	Culiuc Leonid	1950	dr.hab.	1	01.01.2020	31.12.2023
2.	Clochișner Sofia	1949	dr.hab.	1	01.01.2020	31.12.2023
3.	Țurcan Vladimir	1951	dr.hab.	1	01.01.2020	31.12.2023
4.	Ostrovșchii Serghei	1968	dr.hab.	1	01.01.2020	31.12.2023
5.	Filippova Irina	1955	dr.	1	01.01.2020	31.12.2023
6.	Kulikova Olga	1952	dr.	1	01.01.2020	31.12.2023
7.	Reu Oleg	1976	dr.	1	01.01.2020	31.12.2023
8.	Siminel Anatolii	1956	dr.	1	01.01.2020	31.12.2023
9.	Sușchevici Constantin	1943	dr.	0,5	01.01.2020	31.12.2023
10.	Nazarov Mihail	1946	dr.	0,5	01.01.2020	31.12.2023
11.	Croitori Dorina	1990	dr.	1	01.01.2020	31.12.2023
12.	Felea Viorel	1980	dr.	1	01.01.2020	30.06.2022
13.	Prodan Lilian	1991	dr.	1	01.01.2020	31.12.2023
14.	Roman Marianna	1985	dr.	1	01.01.2020	31.12.2023
15.	Goremîchin Vladimir	1952	-	0,5	01.01.2020	31.12.2023
16.	Micu Alexandru	1963	-	1	01.01.2020	31.12.2023
17.	Pasenco Leonid	1951	-	0,5	01.01.2020	10.05.2022
18.	Siminel Nikita	1987	-	1	01.01.2020	31.12.2023
19.	Nedelea Vitalie	1981	-	1	01.01.2020	30.12.2022
20.	Conunov Galina	1946	dr.	0,5	01.01.2020	31.05.2021
21.	Loșmanschii Serghei	1990	-	0,5	01.07.2020	11.05.2022
22.	Ciumacov Iurii	1951	dr.	0,5	31.05.2021	31.12.2021
23.	Hustuc Alexandru	1971		0,25	02.01.2023	31.12.2023
24.	Lascova-Baciu Renata	1980		1	01.11.2022	31.12.2023
25.	Slobodeniuc Constantin	1957		1	11.05.2022	31.12.2023
26.	Cuharuc Anatolii	1979	dr.	1	01.04.2022	01.11.2022
<b>TOTAL</b>				<b>17</b>		

Ponderea tinerilor (%) din numărul total al executorilor conform contractului de finanțare 15,8%

Conducătorul de proiect

CULIUC Leonid

Data: 03.01.2023

LȘ



**Formular privind raportarea indicatorilor în cadrul proiectului Programe de Stat  
pentru perioada 2020 – 2023, cifrul 20.80009.5007.19**

Indicator 1	Rezultat				Indicator 2	Rezultat				Indicator 3	Rezultat			
	2020	2021	2022	2023		2020	2021	2022	2023		2020	2021	2022	2023
<b>Nr. de cereri de brevete</b> înregistrate în cadrul proiectului de cercetare finanțat	1	2		3	<b>Nr. de brevete</b> obținute în cadrul proiectului de cercetare finanțat		1			Procentul lucrărilor științifice <b>aplicate în practică, din totalul lucrărilor publicate</b> în cadrul proiectului de cercetare finanțat	0	0	0	0
<b>Total</b>	1	2		3			1				0	0	0	0

Conducătorul de proiect



CLIEC Leonid

*Cliec Leonid*

Data 05.01.2024

LS