

RECEPȚIONAT

Agenția Națională pentru Cercetare

și Dezvoltare _____

_____ 2024

AVIZAT

Secția AȘM _____

_____ 2024

RAPORT ȘTIINȚIFIC ANUAL 2024

privind implementarea proiectului din cadrul concursului
proiecte pentru tineri cercetători

Proiectul Tehnologia de creștere a cristalelor din sistemul multiferic $\text{Fe}_{2-x}\text{Zn}_x\text{Mo}_3\text{O}_8$ și
studiul proprietăților fizice ale acestora

Cifra proiectului 23.70105.5007.15T

Prioritatea strategică Tehnologii inovative, energie sustenabilă, digitalizare

Rectorul

Igor ȘAROV

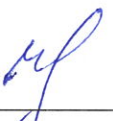
(numele, prenumele)


(semnătura)

Președintele Consiliul Științific

Georgeta STEPANOV

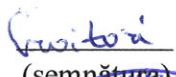
(numele, prenumele)


(semnătura)

Conducătorul proiectului

Dorina CROITORI

(numele, prenumele)


(semnătura)



Chișinău 2024

CUPRINS:

1. Scopul etapei 2024
2. Obiectivele etapei 2024
3. Acțiunile planificate pentru realizarea scopului și obiectivelor etapei 2024
4. Acțiunile realizate pentru atingerea scopului și obiectivelor etapei 2024
5. Rezultatele obținute
6. Diseminarea rezultatelor la foruri științifice
7. Impactul științific, social și/sau economic al rezultatelor științifice obținute în cadrul proiectului 2024
8. Colaborare la nivel național în cadrul implementării proiectului 2024
9. Colaborare la nivel internațional în cadrul implementării proiectului 2024
10. Dificultăți în realizarea proiectului: financiare, organizatorice, legate de resursele umane
11. Recomandări, propuneri
12. Lista lucrărilor științifice, științifico-metodice și didactice publicate în anul 2024 (Anexa 1)
13. Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în proiect 2024 în limba română și în limba engleză (Anexa 2)
14. Executarea devizului de cheltuieli din contractul de finanțare pentru anul 2024 (Anexa 3)
15. Componența echipei conform contractului de finanțare pentru anul 2024 (Anexa 4)

1. Scopul etapei 2024 conform proiectului depus la concurs

Elaborarea tehnologiei de creștere a monocristalelor omogene și cercetarea proprietăților structurale ale poli/monocristalelor în sistemul $Fe_{2-x}Zn_xMo_3O_8$ cu diferit nivel de substituție a ionilor de fier cu zinc.

2. Obiectivele etapei 2024

1. Elaborarea tehnologiei și creșterea monocristalelor multiferoice din sistemul $Fe_{2-x}Zn_xMo_3O_8$ cu compoziție chimică variabilă;
2. Analiza compoziției chimice și determinarea parametrilor structurali ale compușilor obținuți folosind difracția cu raze X pe probe policristaline și monocristaline. Stabilirea repartizării ionilor de zinc în pozițiile tetraedrice și octaedrice în funcție de concentrația de substituție x .

3. Acțiunile planificate pentru realizarea scopului și obiectivelor etapei 2024

Acțiunile planificate pentru anul 2024

1. Elaborarea tehnologiei de obținere a policristalelor/ monocristalelor;
2. Obținerea policristalelor/ monocristalelor cu diferită concentrație de substituție.
3. Determinarea compoziției chimice a monocristalelor prin metoda de spectroscopie cu raze X
4. Analiza purității și compoziției chimice a poli/monocristalelor cu difracția cu raze X pe probe poli- și monocristaline
5. Determinarea parametrilor structurali și stabilirea corelației acestora cu variația concentrației de substituție.

4. Acțiunile realizate pentru atingerea scopului și obiectivelor etapei 2024

1. S-a elaborat tehnologia de creștere a monocristalelor din sistemul $Fe_{2-x}Zn_xMo_3O_8$, cu diferite substituții ($0 \leq x \leq 2$).
2. S-au obținut policristale și monocristale perfecte ale sistemului $FeZnMoO$ cu substituții variabile $0 \leq x \leq 2$.
3. S-au pregătit cristalele pentru cercetări experimentale.
4. S-a determinat compoziția chimică a monocristalelor din sistemul $Fe_{2-x}Zn_xMo_3O_8$ prin metoda de spectroscopie cu raze X.
2. S-a determinat compoziția chimică a policristalelor și monocristalelor prin difracția cu raze X pe probe poli și monocristaline.
3. S-au determinat parametrii structurali ai monocristalelor și s-a stabilit corelația dintre parametrii obținuți și gradul de substituție.

5. Rezultatele obținute (descriere narativă 3-5 pagini)

În cadrul proiectului de cercetare au fost elaborate și optimizate regimurile tehnologice de sintetizare a materialelor policristaline și de creștere monocristalelor din sistemul $\text{Fe}_{2-x}\text{Zn}_x\text{Mo}_3\text{O}_8$, cu diferită concentrație de substituție ($0 \leq x \leq 2$).

În prima fază au fost sintetizate policristalele de $\text{Fe}_{2-x}\text{Zn}_x\text{Mo}_3\text{O}_8$ prin metoda reacțiilor chimice în stare solidă utilizând oxizi binari de înaltă puritate: CoO (99,999%), ZnO și MoO_2 (99,9%). Materialul inițial a fost încărcat în ampule de cuarț și vidate la presiunea de 10^{-3} mbar. Ampulele au fost plasate vertical în cuptoare cu mufă pentru perioada de 200 ore la temperatură de 1000 °C. Pentru a reduce probabilitatea apariției fazelor impuritate, procedura descrisă mai sus a fost repetată de două ori pentru fiecare compus. După fiecare experiment de sintetizare conținutul probelor a fost verificat prin difracția cu raze X pe probe în formă de pulbere.

În cea de-a doua fază, materialul policristalin a fost folosit în calitate de material inițial pentru creșterea monocristalelor din sistemului $\text{Fe}_{2-x}\text{Zn}_x\text{Mo}_3\text{O}_8$ cu substituții variabile $0 \leq x \leq 2$. Cristalele au fost crescute prin metoda reacției chimice de transport, la temperaturi cuprinse între 950 și 900 °C, folosind TeCl_4 anhidru ca sursă pentru agentul de transport. Creșterea s-a realizat în ampule duble din cuarț pentru a preveni oxidarea monocristalelor la spargerea ampulei interioare, eveniment care uneori avea loc aproape de etapa finală a procesului de creștere datorită reacției puternice a materialelor chimice cu cuarțul. Cristale strălucitoare de până la 7 mm pentru $\text{Fe}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$ pur (vezi panoul din dreapta în Figura 1) și până la 4 mm pentru $\text{Fe}_{2-x}\text{Zn}_x\text{Mo}_3\text{O}_8$ cu Zn substituit au fost obținute după patru săptămâni de transport. Procesul tehnologic de creștere a monocristalelor $\text{Fe}_{2-x}\text{Zn}_x\text{Mo}_3\text{O}_8$ este schițat în Figura 1.



Figura 1 . Procesul tehnologic de creștere a monocristalelor de tip $\text{Fe}_{2-x}\text{Zn}_x\text{Mo}_3\text{O}_8$ cu substituții variabile $0 \leq x \leq 2$. Partea stângă demonstrează procesul experimental cu schițarea încărcăturii ampulei de cuarț. Partea dreaptă prezintă imaginea optică a unui monocristal de $\text{Fe}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$ obținut prin metoda reacțiilor chimice de transport. Axele de coordonate reprezintă planul ab (2-1-10, -12-10) și axa c (0001) pentru structura hexagonală cu simetria $P6_3mc$.

Analiza structurală a fost efectuată prin difracția cu raze X efectuată pe pulbere atât ale materialelor policristaline cât și monocristaline. Datele XRD de înaltă rezoluție au fost colectate la linia de fascicul ID22 a European Synchrotron Radiation Facility (ESRF, Grenoble), utilizând o lungime de undă de 0,35423 Å și un sistem de detectoare multi-analizator.

Studiile difracției cu raze X au confirmat că atât probele policristaline cât și cele monocristaline de tip $\text{Fe}_{2-x}\text{Zn}_x\text{Mo}_3\text{O}_8$. În urma analize s-a confirmat calitatea înaltă a probelor

obținute. A fost confirmat caracterul monofazic a materialelor obținute. În unele cazuri, pentru probele policristaline s-au depistat urme minore de oxizi care nu au reactionat chimic (de obicei în jur de 1% sau mai puțin).

Datele experimentale de înaltă rezoluție pentru mai multe compoziții de $\text{Fe}_{2-x}\text{Zn}_x\text{Mo}_3\text{O}_8$ sunt prezentate în Figura 2. Reflexiile ascuțite observate în toate probele confirmă omogenitatea excelentă a cristalelor noastre și absența oricărei scăderi a simetriei față de grupul spațial hexagonal P_63mc .

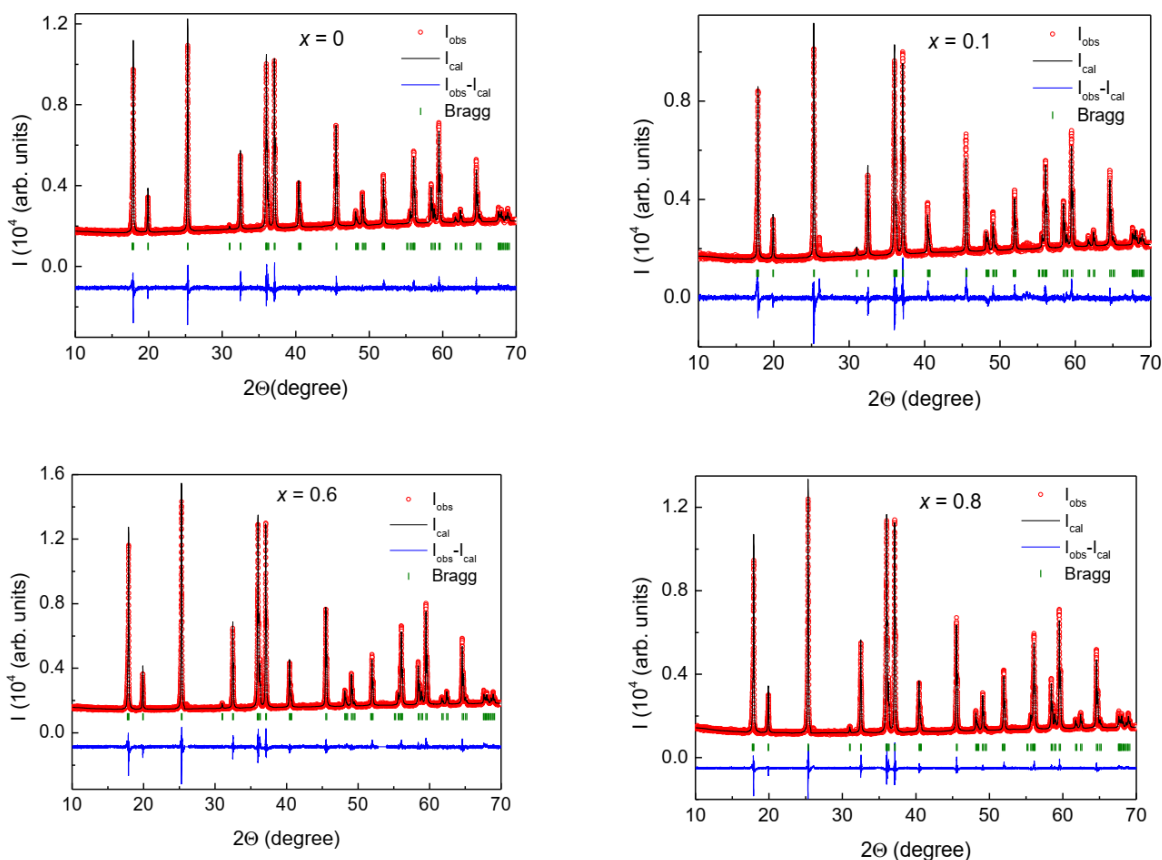


Figure 2. Modelele de difracție a razelor X pe pulberi pentru probe policristaline de $\text{Fe}_{2-x}\text{Zn}_x\text{Mo}_3\text{O}_8$ cu diferite concentrații de Zn (x , conform compoziției inițiale). Cercurile deschise (de culoare roșie) reprezintă intensitățile observate experimental, linia neagră continuă reprezintă intensitatea calculată, linia albastră continuă reprezintă diferența dintre intensitățile observate și cele calculate, iar liniile verticale verzi marchează pozițiile maximelor.

Datele experimentale au fost analizate prin metoda Rietveld, utilizând programul JANA. Parametrii structurali, a și c , obținuți pentru probe policristaline sunt prezentați în Figura 3. Parametrul rețelei a arată o ușoară scădere inițială odată cu substituția până la $x = 0,2$, după care devine aproape constant cu creșterea suplimentară a valorii x până la $0,8$, după care iarăși scade până la concentrația $x = 1,3$. În același timp, parametrul rețelei c prezintă o scădere monotonă cu creșterea concentrației x pentru acest interval de substituții. Pentru intervalul de substituție $0 \leq x \leq 0,8$, raportul c/a arată o scădere continuă. Pe de altă parte, în proba cu $x = 1,5$, ambii parametri ai rețelei prezintă o creștere semnificativă comparativ cu valorile obținute pentru $0 \leq x \leq 0,8$.

În încercarea de a descoperi distribuția atomilor de dopant, am variat gradul de ocupare al ionilor de Fe și Zn pe pozițiile tetraedrice și octaedrice. În urma analizei s-a constatat o preferință puternică a ionilor de Zn pentru ocuparea pozițiilor tetraedrice în cazul concentrațiilor de substituție $0 < x < 1,3$. Acest rezultat contrastează cu cele raportate anterior pentru un sistem similar, $\text{Co}_{2-x}\text{Zn}_x\text{Mo}_3\text{O}_8$, unde, pentru regimul de dopaj scăzut ($x < 0,2$), ionii Zn^{2+} ocupă pozițiile coordonate octaedric, deși la un nivel mai mare de dopaj aceștia arată, de asemenea, o preferință clară pentru pozițiile tetraedrice. Această substituție selectivă a ionilor de Zn influențează puternic atât interacțiunile de schimb intra-strat, cât și cele inter-strat. Se anticipează ca acest lucru v-a duce la stabilizarea fazei antiferromagnetice a compusului $\text{Fe}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$, ceea ce v-a influența puternic proprietățile multiferoice ale acestor compuși.

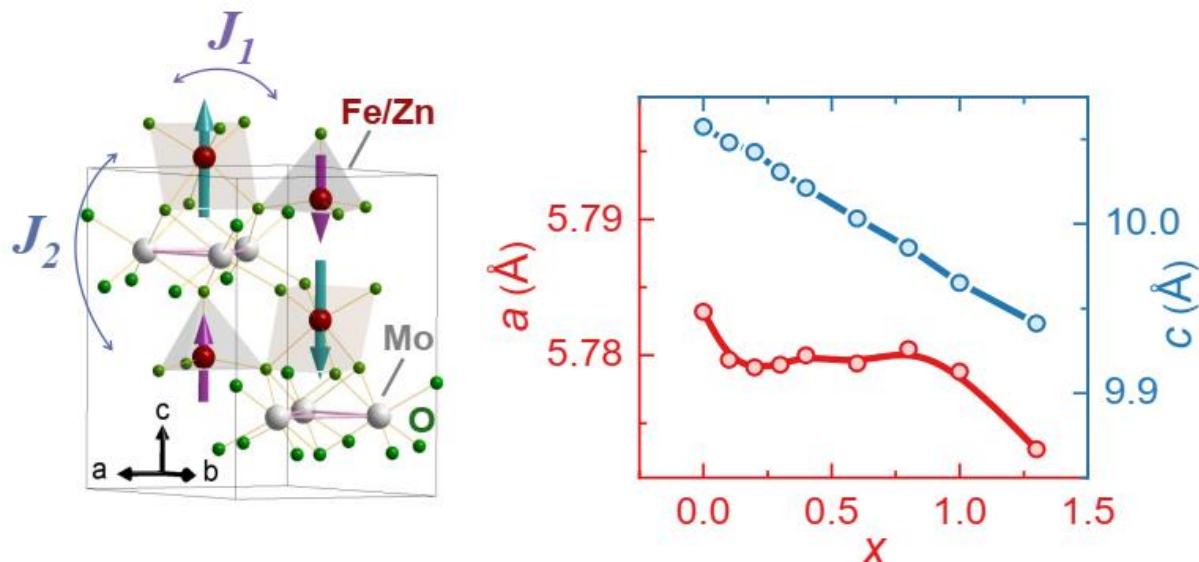


Figura 3. Panelul din dreapta: Reprezentarea schematică a aranjării atomilor în structura cristalină a compusului $\text{Fe}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$ dopat du Zn. Panelul din stânga: Variația constantelor a și c ale rețelei în funcție de substituție.

Compoziția chimică a probelor monocristaline de $\text{Fe}_{2-x}\text{Zn}_x\text{Mo}_3\text{O}_8$ obținute în cadrul acestui proiect a fost determinată prin analiza dispersiei de raze X (EDX). S-a observat că concentrația reală de Zn în cristalele obținute este semnificativ mai mică decât cea din materialul policristalin inițial. În Tabelul 1 este comparată concentrația inițială și cea reală pentru diferite probe. De asemenea, am remarcat o lipsă de reproducibilitate în procesul de substituție pentru probele monocristaline. De exemplu, cristalele din loturile P3 și P4 au fost crescute din aceleași policristale inițiale în condiții termice similare. Cu toate acestea, analiza EDX a arătat concentrații diferite de Zn în probele din aceste două loturi.

Această lipsă de reproducibilitate este probabil legată de o disproporționare a oxidului cuaternar în prezența agentului de transport la temperaturi ridicate. Într-adevăr, o cantitate substanțială de Zn metalic și monocristale de MoO_2 cu structură monoclinică au fost găsite în produsul final.

În concluzie, în cadrul proiectului, au fost dezvoltate și optimizate metode tehnologice pentru sintetizarea policristalelor și creșterea monocristalelor din sistemul $\text{Fe}_{2-x}\text{Zn}_x\text{Mo}_3\text{O}_8$, cu concentrații variabile de substituție. S-a remarcat o discrepanță între concentrațiile inițiale și reale de Zn în

monocristale, atribuind acest fapt disproporționării oxidului cuaternar la temperaturi ridicate. Analiza structurală a confirmat calitatea înaltă a probelor și caracterul lor monofazic, deși în policristale s-au observat urme minore de oxizi nereacționați. Studiile au arătat o preferință a ionilor Zn pentru pozițiile tetraedrice în intervalul de substituție $0 < x < 1,3$, iar această substituție selectivă este anticipată să influențeze interacțiunile magnetice, cu potențial impact asupra proprietăților multiferoice.

Tabelul 1. Compozițiile inițiale ale policristalelor și concentrațiile reale de Zn (x) în cristalele de $\text{Fe}_{2-x}\text{Zn}_x\text{Mo}_3\text{O}_8$. De menționat că concentrațiile determinate prin EDX au o eroare de $\pm 5\%$.

Numele probei	Compoziția inițială (în policristale)	Concentrația nominală a Zn-lui	Concentrația reală a Zn-lui
P1	$\text{Fe}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$	0	-
P2	$\text{Fe}_{1.8}\text{Zn}_{0.2}\text{Mo}_3\text{O}_8$	0.2	0.07
P3	$\text{Fe}_{1.6}\text{Zn}_{0.4}\text{Mo}_3\text{O}_8$	0.4	0.17
P4	$\text{Fe}_{1.6}\text{Zn}_{0.4}\text{Mo}_3\text{O}_8$	0.4	0.23
P5	$\text{Fe}_{1.4}\text{Zn}_{0.6}\text{Mo}_3\text{O}_8$	0.6	0.44
P6	$\text{Fe}_{1.3}\text{Zn}_{0.7}\text{Mo}_3\text{O}_8$	0.7	0.55
P7	$\text{Fe}_{1.2}\text{Zn}_{0.8}\text{Mo}_3\text{O}_8$	0.8	0.66

6. Diseminarea rezultatelor la foruri științifice

Participări în cadrul manifestărilor științifice internaționale

PRODAN, L., CROITORI, D., FILIPPOVA, I. G., ROMAN, M., SHOVA, S., TSURKAN, V.
Zn-substitution effect in multiferroic $\text{Fe}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$ (Efectele de substituție cu Zn în compusul multiferroic $\text{Fe}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$).

International Conference on Materials Science and Condensed Matter Physics, ediția a X-a, 1- 4 Octombrie, 2024.

PRODAN, L., CROITORI, D., FILIPPOVA, I. G., SHOVA, S., TSURKAN, V., KEZSMARKI I.
Site-selective substitution effects on the magnetic phase diagram of multiferroic $\text{Fe}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$.
DPG Spring Meeting of the Condensed Matter Section, 16 - 21 Martie, 2024.

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

Rezultatele obținute în cadrul proiectului au un impact științific semnificativ datorită contribuției lor la înțelegerea fundamentală și aplicativă a sistemelor multiferoice din clasa $\text{Fe}_{2-x}\text{Zn}_x\text{Mo}_3\text{O}_8$. Acestea pot fi evaluate astfel:

1. **Progres în sinteza materialelor avansate:** Dezvoltarea și optimizarea tehnologiilor de sintetizare a policristalelor și creșterea monocristalelor de înaltă calitate, cu concentrații controlate de substituție, oferă un model reproductibil pentru studierea altor compuși din aceeași clasă.

2. **Contribuții la înțelegerea proprietăților structurale:** Studiul substituției selective a ionilor de Zn și impactul asupra interacțiunilor de schimb intra-strat și inter-strat evidențiază posibilități de control al fazelor magnetice, deschizând noi direcții pentru proiectarea materialelor cu proprietăți magnetice reglabile.
3. **Consolidarea metodologiilor analitice:** Utilizarea tehnicilor de analiză de înaltă rezoluție, precum difracția cu raze X și analiza dispersiei de raze X (EDX), contribuie la creșterea preciziei în caracterizarea materialelor complexe, fiind aplicabilă în diverse alte studii științifice.

Aceste rezultate deschid noi oportunități în cercetarea fundamentală a materialelor multiferoice și pot contribui la dezvoltarea tehnologică în domenii emergente precum electronica avansată și energiile alternative.

8. Colaborare la nivel național în cadrul implementării proiectului

9. Colaborare la nivel internațional în cadrul implementării proiectului

Dr. Dorina Croitori a efectuat o vizită de lucru la Institutul de Fizică al Universității din Augsburg unde a avut acces la aparataj modern de creștere a monocristalelor și cercetare avansată a proprietăților fizice.

A fost stabilită o relație de colaborare cu colegi de la Centrul European de Radiație Sincrotron (ESRF, Grenoble), ceea ce va facilita accesul pe viitor la experimente XRD de înaltă rezoluție.

Acest proiect a servit drept platformă de stabilire a colaborării cu colegi de la Institutul de Chimie Moleculară din Iași, care ne ajută la caracterizarea proprietăților structurale prin metoda difracției cu raze X pe probe monocristaline.

10. Dificultățile în realizarea proiectului: financiare, organizatorice, legate de resursele umane etc.

Accesul la facilitățile Centrului European de Radiație Sincrotron (ESRF, Grenoble) se face în bază de concurs. Timpul de aplicare, examinare a proiectului și planificarea propriu-zisă a experimentului durează de la 6 la 8 luni. Respectiv, din cauza numărului mare de probe și a timpului limitat de acces la instalația de măsurare, nu s-a reușit caracterizarea cu raze X a întregului lot de probe monocristaline. Această dificultate va fi compensată în perioada Martie-Iunie 2025.

11. Recomandări, propuneri

Conducătorul de proiect Croitori Dorina

Data: _____

L.Ș.

**Lista lucrărilor științifice, științifico-metodice și didactice
publicate în anul 2024 în cadrul proiectului**

**„Tehnologia de creștere a cristalelor din sistemul multiferic $\text{Fe}_{2-x}\text{Zn}_x\text{Mo}_3\text{O}_8$ și studiul
proprietăților fizice ale acestora”**
(denumirea proiectului)

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

1.1. monografii internaționale

1.2. monografii naționale

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

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

4. **Articole în reviste științifice**

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

4.2. în alte reviste din străinătate recunoscute

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

4.4. în alte reviste naționale

5. **Articole în culegeri științifice naționale/internaționale**

5.1. culegeri de lucrări științifice editate peste hotare

5.2. culegeri de lucrări științifice editate în Republica Moldova

6. **Articole în materiale ale conferințelor științifice**

6.1. în lucrările conferințelor științifice internaționale (peste hotare)

6.2. în lucrările conferințelor științifice internaționale (Republica Moldova)

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)

7.2. în lucrările conferințelor științifice internaționale (Republica Moldova)
PRODAN, L., CROITORI, D. , FILIPPOVA, I. G., ROMAN, M., SHOVA, S., TSURKAN, V. Zn-substitution effect in multiferroic $\text{Fe}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$ (Efectele de substituție cu Zn în compusul multiferroic $\text{Fe}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$). International Conference on Materials Science and Condensed Matter Physics, ediția a X-a, 1- 4 October, 2024. Book of Abstracts, p.80. ISBN 978-9975-62-763-4.

7.3. în lucrările conferințelor științifice naționale cu participare internațională

7.4. în lucrările conferințelor științifice naționale

Notă: *vor fi considerate teze și nu articole materialele care au un volum de până la 0,25 c.a.*

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

8.1. cărți (cu caracter informativ)

8.2. enciclopedii, dicționare

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

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

10. Lucrări științifico-metodice și didactice

10.1. manuale pentru învățământul preuniversitar (aprobate de ministerul de resort)

10.2. manuale pentru învățământul universitar (aprobate de consiliul științific /senatul instituției)

10.3. alte lucrări științifico-metodice și didactice

Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în proiect în anul 2024

În cadrul proiectului de cercetare, s-au elaborat și optimizat regimurile tehnologice pentru sintetizarea materialelor policristaline și creșterea monocristalelor din sistemul multiferic $\text{Fe}_{2-x}\text{Zn}_x\text{Mo}_3\text{O}_8$ cu concentrații variabile de substituție ($0 \leq x \leq 2$). În prima fază, s-au sintetizat policristalele prin reacții chimice în stare solidă, utilizând oxizi binari de înaltă puritate (CoO , ZnO și MoO_2). Procesul de sinteză a implicat încărcarea materialului inițial în ampule de cuarț, urmată de tratarea termică la 1000°C timp de 200 de ore. Calitatea compoziției a fost verificată prin difracție cu raze X, iar pentru a reduce apariția fazelor impuritate, procedura a fost repetată de cel puțin două ori pentru fiecare compus.

În cea de-a doua fază, materialele policristaline au fost utilizate ca sursă pentru creșterea monocristalelor prin metoda reacției chimice de transport, folosind TeCl_4 anhidru drept agent de transport. Creșterea a avut loc în ampule duble din cuarț la temperaturi cuprinse între 950 și 900°C , pentru o perioadă de patru săptămâni, obținându-se cristale strălucitoare de până la 7 mm pentru $\text{Fe}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$ (vezi Figura 1) și până la 4 mm pentru compușii cu diferită concentrație de Zn. Analiza structurală a fost realizată prin difracția cu raze X, utilizând echipamente de înaltă rezoluție de la ESRF Grenoble, confirmând calitatea ridicată a probelor și caracterul monofazic al materialelor sintetizate. S-a demonstrat că substituția ionilor magnetici nu provoacă reducerea simetriei cristaline, care rămâne $P6_3mc$ pentru $0 \leq x \leq 2$.

Analiza structurală a arătat o variație a parametrilor rețelei cristaline (a și c) în funcție de concentrația de substituție, evidențiind o scădere inițială a parametrului a până la $x = 0,2$, urmată de o stabilizare și o scădere ulterioară (vezi Figura 1). Parametrul c a prezentat o scădere monotonă pentru intervalul $0 \leq x \leq 1,5$, iar raportul c/a a arătat o scădere continuă. Studiul distribuției atomilor Zn a indicat o preferință clară a ionilor Zn^{2+} pentru pozițiile tetraedrice la concentrații de substituție $0 < x < 1,3$, influențând interacțiunile de schimb intra-strat și inter-strat.

Aceste rezultate au un impact științific semnificativ datorită contribuției la dezvoltarea tehnologie de sintetizare și creștere a materialelor cu proprietăți avansate și la înțelegerea fundamentală și aplicativă a sistemelor multiferice din clasa $\text{Fe}_{2-x}\text{Zn}_x\text{Mo}_3\text{O}_8$.

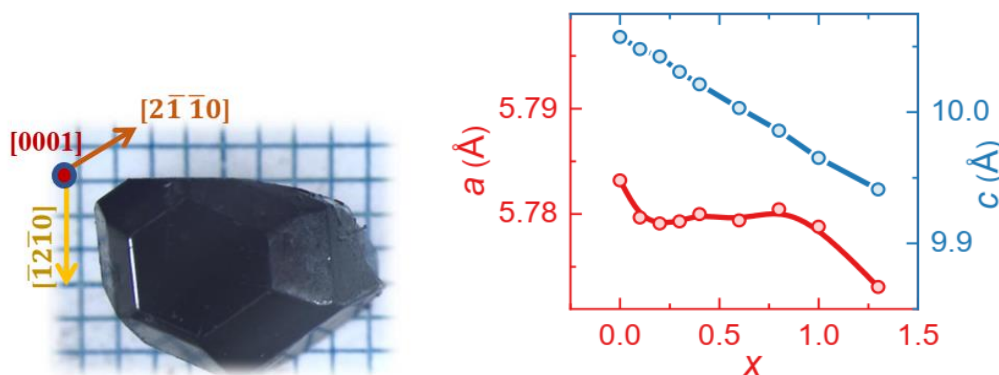


Figura 1. Imaginea optică a unui monocristal de $\text{Fe}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$ obținut prin metoda reacțiilor chimice de transport și variația constantelor rețelei a și c în funcție de substituție x .

Within the research project, technological regimes were developed and optimized for synthesizing polycrystalline materials and growing single crystals of the multiferroic $\text{Fe}_{2-x}\text{Zn}_x\text{Mo}_3\text{O}_8$ system with variable substitution concentrations ($0 \leq x \leq 2$). In the first phase, polycrystals were synthesized via solid-state reactions method using high-purity binary oxides (CoO , ZnO , and MoO_2). The synthesis process involved loading the starting material into quartz ampoules, followed by thermal treatment at 1000°C for 200 hours. The composition quality and phase purity were verified using X-ray diffraction. To minimize the occurrence of impurity phases, the procedure was repeated at least twice for each compound.

In the second phase, polycrystalline materials were used as the source of transport for single crystal growth via the chemical transport reaction method. The anhydrous TeCl_4 was used as the transport agent. Growth was carried out in double quartz ampoules at temperatures ranging between 950 and 900°C for a period of four weeks, yielding shiny crystals up to 7 mm in size for $\text{Fe}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$ (see Figure 1) and up to 4 mm for compounds with varying Zn concentrations. Structural analysis was conducted via high-resolution synchrotron X-ray diffraction using equipment at the ESRF in Grenoble. These experiments confirmed the high quality of the crystals and the monophasic nature of the synthesized materials. It was demonstrated that the substitution of magnetic ions does not reduce the crystalline symmetry, which remains $\text{P6}_3\text{mc}$ -type for up to $x = 2$.

Structural analysis revealed variations in lattice parameters (a and c) as a function of substitution concentration x , showing an initial decrease in parameter a up to $x = 0.2$, followed by stabilization and subsequent reduction (see Figure 1). Parameter c exhibited a monotonic decrease for the range $0 \leq x \leq 1.5$, while the c/a ratio showed a continuous decline. The study of Zn atom distribution indicated a clear preference for Zn^{2+} ions occupying tetrahedral positions at substitution concentrations $0 < x < 1.3$, influencing intra-layer and inter-layer exchange interactions.

These results have significant scientific impact due to their contribution to the development of synthesis and growth technologies for materials with advanced properties, as well as to the fundamental and applied understanding of multiferroic systems in the $\text{Fe}_{2-x}\text{Zn}_x\text{Mo}_3\text{O}_8$ class.

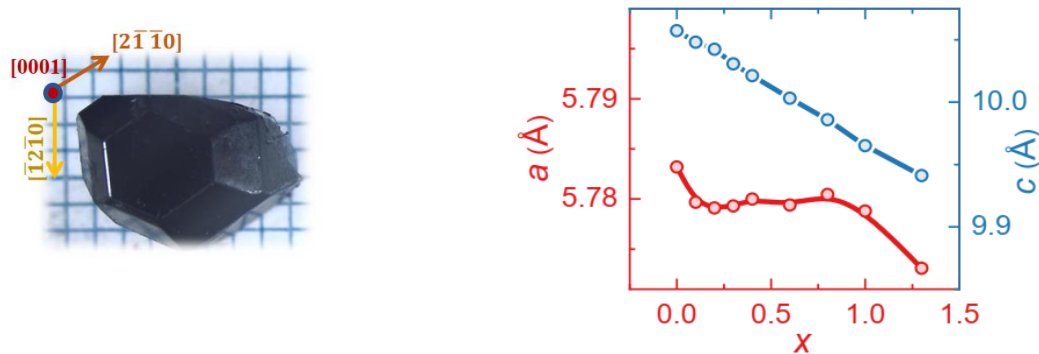
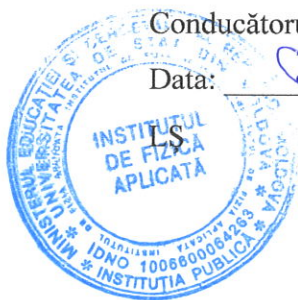


Figure 1. The optical image of a $\text{Fe}_2\text{Mo}_3\text{O}_8$ single crystal grown by the chemical transport reaction method and the variation of lattice constants a and c as a function of substitution x .

Conducătorul de proiect Croitori Dorina

Data: Croitori



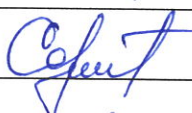
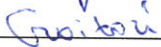
Executarea devizului de cheltuieli,
conform anexei nr. 2.3 din contractul de finanțare pentru anul 2024
Cifrul proiectului: 23.70105.5007.15T

Cheltuieli, mii lei				
Denumirea	Cod		Anul de gestiune	
	Eco (k6)	Aprobat	Modificat +/-	Precizat
Remunerarea muncii temporare	211200	81,1		81,1
Contribuții de asigurări sociale de stat obligatorii	212100	19,4		19,4
Alte cheltuieli în bază de contracte cu persoane fizice	281600	25,9		25,9
Deplasări în interes de serviciu peste hotare	222720	45,3		45,3
Procurarea mașinilor și utilajelor	314110	26,2		26,2
Procurarea materialelor de uz gospodăresc și rechizitelor de birou	336110	2,1		2,1
Total		200,0		200,0

Conducătorul organizației Igor ȘAROV

Contabil șef Liliana COJOCARU

Conducătorul de proiect Dorina CROITORI

Data: _____

LȘ



Componența echipei conform contractului de finanțare 2024

Cifrul proiectului 23.70105.5007.15T

Echipa proiectului conform contractului de finanțare (la semnarea contractului) pentru 2024						
Nr	Nume, prenume (conform contractului de finanțare)	Anul nașterii	Titlul științific	Norma de muncă conform contractului	Data angajării	Data eliberării
1.	Croitori Dorina	1990	Dr	0.5	03.01.2024	31.12.2024
2.	Prodan Lilian	1991	Dr	0.5	03.01.2024	31.12.2024
3.	Morari Vadim	1992		0.25	03.01.2024	31.12.2024

Modificări în componența echipei pe parcursul anului 2024					
Nr	Nume, prenume	Anul nașterii	Titlul științific	Norma de muncă conform contractului	Data angajării
1.					
2.					
3.					
4.					
5.					
6.					
7.					

Conducătorul organizației Igor ȘAROVContabil șef Liliana COJOCARUConducătorul de proiect Dorina CROITORI

Data:

LȘ



11/

Croitori

Croitori