

Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în subprogram în anul 2025

“Materiale funcționale 2D și 3D oxicalcogenice, metale și polimeri cu proprietăți avansate magnetice, fotoelectrice, optice și bioactive pentru aplicații în spintronică, optoelectronică și biomedicină”

Codul subprogramului 011202

A fost elaborată tehnologia de creștere și obținute monocristalele perfecte $\text{Fe}_{2-x}\text{Zn}_x\text{Mo}_3\text{O}_8$ cu concentrația de substituție a ionilor de fier cu zinc variabilă în regiunea $0 < x < 2$. Analiza structurală a stabilit că ionii de zinc ocupă preponderent pozițiile tetraedrice, ceea ce indică caracterul selectiv al substituției. Măsurătorile magnetice și termodinamice au depista că tranziția de la ordonarea antiferomagnetică la cea ferimagnetică are loc la compoziția $x=0.2$.

A fost elaborată o rută tehnologică pentru fabricarea heterostructurilor van der Waals $\text{MoS}_2/\text{PEA}_2\text{SnI}_4$. Au fost obținute filme subțiri uniforme de perovskit 2D pe substraturi Si/SiO₂ și stabilite proprietățile lor optice și structurale. Procesul CVD a fost modificat pentru temperaturi scăzute, asigurând creșterea monostratului de MoS₂ evitând degradarea perovskitului subiacent. Caracterizările optice și structurale au confirmat păstrarea identității ambelor materiale și formarea unei interfețe perfecte. Rezultatele validează fezabilitatea integrării perovskiților 2D cu TMD-uri pentru aplicații optoelectronice.

A fost elaborată o nouă abordare microscopică pentru descrierea tranzițiilor de spin induse de transferul protonilor pentru a descrie datele experimentale în compusul $[\text{Fe}(\text{HL}-\text{F})_2](\text{AsF}_6)_2$. Este propus un model care descrie influența protonării liganzilor asupra tranzițiilor de spin în complexii Fe(II) și elucidate condițiile, când protonarea facilitează sau suprimă aceste tranziții. A fost propus un nou model pentru explicarea tranzițiilor de spin induse de transferul sarcinii în clusterii tetranucleari Fe_2Co_2 care descrie cantitativ caracteristicile magnetice ale compusului $\{[(\text{Tp}^*)\text{Fe}(\text{CN})_3]_2[\text{Co}(\text{bpyMe})_2]_2\}(\text{OTf})_2 \cdot 2\text{DMF} \cdot \text{H}_2\text{O}$.

Au fost obținute și investigate noi materiale pentru aplicații optoelectronice, inclusiv semiconductorii de tip kesterit și semimetalul Dirac Cd_3As_2 . Evaluarea calității compușilor sintetizați sub formă de monocristale și straturi subțiri a fost efectuată prin analize structurale, compoziționale și de transport electric. Studiile au evidențiat rolul dominant al defectelor de tip Cu_{Zn} și mecanismul de conductibilitate Mott cu salt variabil. Analiza Raman a indicat tranziția structurală kesterit–stanit în soluțiile solide $\text{Cu}_2\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{SnS}_4$. Materialele pe bază de Cd_3As_2 au manifestat proprietăți de transport clasice și cuantice, confirmând potențialul lor aplicativ.

Au fost stabilite noi particularități ale înregistrării imaginilor raster cu fascicul de electroni în structura nanoperiodică multistrat $\text{Ge}_5\text{As}_{37}\text{S}_{58}/\text{Se}$. Au fost obținute straturi subțiri din compusul coordinativ $[\text{Eu}(\text{DBM})_3(\text{phen})]$ și caracterizate prin microscopia AFM și IR. A fost caracterizat structural și compozițional materialul $(\text{As}_{45}\text{S}_{15}\text{Se}_{40})_{1-x}\text{Sn}_x$ și evidențiată natura amorfă și omogenă a probelor, precum și un efect fotoindus semnificativ în urma iradierii lor cu lumină violetă. A fost studiat un biosistem cu lipide, antioxidanți și radicali ai acestora. Caracteristicile modelului au elucidat capacitatea flavonoidelor de a reduce rata de inițiere a procesului de peroxidare și efectul sinergic al vitaminei C asupra vitaminei E și flavonoide.

A fost elaborată o metodă nouă de obținere a ceramicii $\text{Ga}_2\text{O}_3:\text{Sn}$ și $\text{Ga}_2\text{O}_3(\text{ZnO})_k$ ($k = 6-16$) care asigură majorarea conductivității acesteia cu câteva ordine de mărime. A fost sintetizată ceramica de hidroxiapatită cu adaos de Zn sau Sn în vederea creșterii conductivității materialului. Au fost stabilite mecanismele gradual și ”in-salt” de tranziție elasto-plastică la nanoindentarea cristalului MgO și analizați factorii, care influențează dezvoltarea lor. Au fost determinați parametrii de coroziune și stările de tensiuni-deformații în aliajele de Zr supuse ”extrudării unghiulare în canale egale”.

Summary of the activity and results obtained in the sub-programme in 2025

“Functional 2D and 3D oxychalcogenic materials, metals and polymers with advanced magnetic, photoelectric, optical and bioactive properties for applications in spintronics, optoelectronics and biomedicine”

Subprogram code 011202

The technology of growth was developed and perfect single crystals of $\text{Fe}_{2-x}\text{Zn}_x\text{Mo}_3\text{O}_8$ were obtained, with a variable substitution concentration of iron ions by zinc in the range $0 < x < 2$. Structural analysis established that zinc ions predominantly occupy tetrahedral sites, indicating the selective nature of the substitution. Magnetic and thermodynamic measurements revealed that the transition from antiferromagnetic to ferrimagnetic ordering occurs at the composition $x = 0.2$.

A technological route for the fabrication of van der Waals $\text{MoS}_2/\text{PEA}_2\text{SnI}_4$ heterostructures was developed. Uniform thin films of 2D perovskite were obtained on Si/SiO_2 substrates, and their optical and structural properties were established. The CVD process was modified to operate at low temperatures, enabling the growth of a MoS_2 monolayer while avoiding degradation of the underlying perovskite. Optical and structural characterizations confirmed the preservation of the identity of both materials and the formation of a high-quality interface. These results validate the feasibility of integrating 2D perovskites with TMDs for optoelectronic applications.

A new microscopic approach was developed to describe spin transitions induced by proton transfer in order to interpret experimental data for the compound $\text{Fe}(\text{HL-F})_2$. A model is proposed that describes the influence of ligand protonation on spin transitions in $\text{Fe}(\text{II})$ complexes and elucidates the conditions under which protonation facilitates or suppresses these transitions. In addition, a new model was proposed to explain charge-transfer-induced spin transitions in tetranuclear Fe_2Co_2 clusters, which quantitatively describes magnetic characteristics of the compound $\{[(\text{Tp}^*)\text{Fe}(\text{CN})_3]_2[\text{Co}(\text{bpyMe})_2]_2\}(\text{OTf})_2 \cdot 2\text{DMF} \cdot \text{H}_2\text{O}$.

New materials for optoelectronic applications were obtained and investigated, including kesterite-type semiconductors and the Dirac semimetal Cd_3As_2 . The quality of the synthesized compounds in the form of single crystals and thin films was evaluated using structural, compositional, and electrical transport analyses. The studies revealed the dominant role of CuZn -type defects and a Mott variable-range hopping mechanism of the conductivity. Raman analysis indicated a kesterite–stannite structural transition in the solid solutions $\text{Cu}_2\text{Zn}_{1-x}\text{Cd}_x\text{SnS}_4$. Cd_3As_2 -based materials exhibited both classical and quantum transport properties, confirming their application potential.

New features of raster image formation using an electron beam in multilayer nanoporous $\text{Ge}_5\text{As}_{37}\text{S}_{58}/\text{Se}$ structures were identified. Thin films of the coordination compound $[\text{Eu}(\text{DBM})_3(\text{phen})]$ were obtained and characterized by AFM microscopy and IR spectroscopy. The material $(\text{As}_{45}\text{S}_{15}\text{Se}_{40})_{1-x}\text{Sn}_x$ was structurally and compositionally characterized, revealing its amorphous and homogeneous nature, as well as a significant photoinduced effect following irradiation with violet light. A biosystem involving lipids, antioxidants, and their radicals was investigated. The model characteristics elucidated the ability of flavonoids to reduce the initiation rate of peroxidation processes and the synergistic effect of vitamin C on vitamin E and flavonoids.

A new method for obtaining $\text{Ga}_2\text{O}_3:\text{Sn}$ and $\text{Ga}_2\text{O}_3(\text{ZnO})_k$ ($k = 6-16$) ceramics was developed, ensuring an increase in electrical conductivity by several orders of magnitude. Hydroxyapatite ceramics doped with Zn or Sn were synthesized to enhance material conductivity. Gradual and “pop-in” mechanisms of elastoplastic transition during nanoindentation of MgO crystals were established, and the factors influencing their development were analyzed. Corrosion parameters and stress–strain states were determined for zirconium alloys subjected to equal-channel angular extrusion.