

Raport Stiintific
privind implementarea proiectului cu titlul "Influenta temperaturii si a presiunii inalte in
compusi pe baza de Fe cu ordonare de sarcina"
Acronim : COFeIn



-2014-

Parteneri: 1. INCEMC Timisoara, Romania; Responsabil : *Dr Maria Poienar*
2. Laboratoire Crismat Caen, Franta; Responsabil : *Dr Anne Guesdon*
3. Institut Charles Gerhardt Montpellier, Franta; Responsabil : *Dr Jerome Rouquette*

Proiectul COFeIn isi propune obtinerea si studiul oxizilor pe baza de fier (Fe/P/O si Fe/B/O) care prezinta ordonare de sarcina (Fe^{2+} si Fe^{3+}) pentru o descriere cat mai detaliata si mai completa a structurii cristaline, a proceselor de ordonare electrica si magnetica intr-un domeniu mare de temperatura si presiune. Activitatile de cercetare specifice proiectului COFeIn sunt urmatoarele:

1. *Sinteza materialelor;*
2. *Caracterizarea morfo-structurala;*
3. *Studiul proprietatilor fizice in functie de temperatura;*
4. *Studiul proprietatilor fizice in functie de presiune;*
5. *Experimente de difractie de neutroni si raze X de inalta rezolutie.*

Implementarea acestor activitati de cercetare este realizata pe parcursul celor trei ani de desfasurare a proiectului si presupune participarea celor trei laboratoare partenere, avand la baza competentele stiintifice complementare ale echipelor, precum si panelul larg de tehnici de laborator si facilitati mari utilizate.

Studiile efectuate asupra fosfatilor de fier (INCEMC si ICG) au condus la obtinerea si caracterizarea mai multor compusi in care fierul are valenta mixta si anume: formele α - si β - $\text{NH}_4\text{Fe}_2(\text{PO}_4)_2$, compusul giniite $\text{Fe}_5(\text{PO}_4)_4(\text{OH})_3 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, formele barbosolite si lipscombite pentru compozitia $\text{Fe}_3(\text{PO}_4)_2(\text{OH})_2$, precum si $\text{Ni}_{11}(\text{HPO}_3)_8(\text{OH})_6$, material sintetizat cu ajutorul instalatiei pentru sinteze hidrotermale la temperaturi si presiuni inalte (realizata in anul 2013). Obtinerea unor compusi care prezinta structuri cristaline diferite pentru aceeasi compozitie chimica prezinta interes sporit in interpretarea relatiilor structura-proprietati caracteristice. Studiile realizate asupra boratilor de fier cu valenta mixta (CRISMAT) au permis in aceasta etapa obtinerea si caracterizarea compusilor: Fe_2BO_4 si Cu_2FeBO_5 .

Aceste materiale au fost caracterizate de cele trei laboratoare partenere, conform planului de lucru si a repartitiei prevazute in proiect. Astfel, proprietatile materialelor obtinute au fost studiate prin: XRD pe pulbere (INCEMC, CRISMAT), analize termogravimetrice (INCEMC, CRISMAT), SEM (INCEMC, CRISMAT) si TEM (CRISMAT) cuplate cu analizele EDX si de asemenea, au fost determinate proprietatile magnetice si electrice (CRISMAT). Mai mult, au fost efectuate studii structurale (XRD) si vibrationale (spectroscopie Raman) in functie de presiune pentru $\text{Fe}_3(\text{PO}_4)_2(\text{OH})_2$ si $\text{NH}_4\text{Fe}_2(\text{PO}_4)_2$ (ICG).

Cercetarile din cadrul acestui proiect au permis abordarea unei noi directii de cercetare astfel, cercetatorii din INCEMC si Crismat, au depus o propunere de proiect cu titlul "Sinteza, comportamentul termic si proprietatile fizice si chimice ale hidroxifosfatilor Fe-P-O-OH" in cadrul competitiei: Cooperare bilaterala Romania-Franta (PICS) 2014. Acest proiect isi propune studiul compusilor $\text{Fe}_3(\text{PO}_4)_2(\text{H}_2\text{O})_n$ cu $n = 3$ (phosphoferrite), 4 (ludlamite), 8 (vivianite) in care fierul este in stare divalenta.

Intalniri de lucru

- la INCEMC, 19-23 mai, Timisoara, Romania.