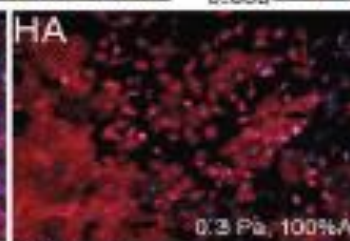
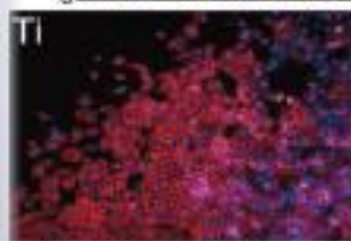
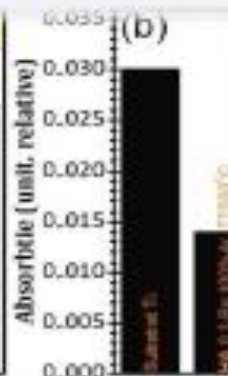
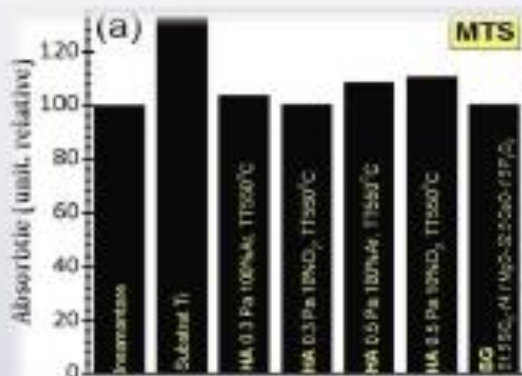


INSTITUTUL NAȚIONAL DE CERCETARE-DEZVOLTARE
PENTRU FIZICA MATERIALELOR

*Multidisciplinaritate și Sinergie în Domeniul
Fizicii Stării Condensate și al Materialelor
Funcționale (MS-FISCOMAT)
PN16-4801*

RAPORT ANUAL DE ACTIVITATE

2016



Contractor :INCDFM.....

Cod fiscal : RO9068280.....

RAPORT ANUAL DE ACTIVITATE
privind desfășurarea programului nucleu
Multidisciplinaritate si Sinergie in Domeniul Fizicii Starii Condensate si al Materialelor
Functionale (MS-FISCOMAT)
PN16-4801
anul 2016

Durata programului: ...2. ani

Data începerii: ...mai 2016.....

Data finalizării: ...dec. 2017.....

1. Scopul programului:

Programul propus continua programele Nucleu din perioada 2003-2015, dedicate cercetarilor avansate in domeniul Fizicii Starii Condensate si al Materialelor. In plus fata de programele Nucleu precedente, noul program isi propune sa aduca o crestere a gradului de multidisciplinaritate a cercetarilor desfasurate in institut, precum si o crestere a sinergiei tematice cu noile directii de cercetare in domeniu asa cum sunt ele enuntate in strategiile si programele nationale sau la nivel de Comunitate Europeana. Activitatile prevazute in cadrul programului vor implica practic toate grupurile de cercetare din institut intr-un efort unit de crestere a performantei institutionale si de transformare a INCDFM intr-un actor important la nivel global in ceea ce priveste dezvoltarile fundamentale si aplicative in domeniile abordate in program.

Conform obiectului sau de activitate, INCDFM desfasoara cercetare fundamentala si aplicativa in domeniul Fizicii Starii Condensate si al Stiintei Materialelor, mergand pana la realizarea de modele experimentale sau la dezvoltarea de noi tehnologii. Planul multianual de dezvoltare a fost elaborat tinand cont de cele mentionate mai sus, cu urmatoarele directii strategice de cercetare, cel putin pentru perioada pana in anul 2018:

- 1. Fizica starii condensate-fenomene si procese in sisteme nano-dimensionale, suprafete si interfete;**
- 2. Sinteza si caracterizarea nanomaterialelor si nanostructurilor;**
- 3. Materiale si structuri functionale cu impact tehnologic.**

Plecand de la aceste directii generale de cercetare, si tinand cont de tendintele din cercetarea in domeniul materialelor functionale si al nanomaterialelor manifestate la nivel global in ultimii ani, au fost stabilite cateva teme concrete de cercetare, dupa cum urmeaza:

A. STUDII FUNDAMENTALE IN DOMENIUL FIZICII STARII CONDENSATE

- Efecte de dimensiune in nano-obiecte si straturi cuantice;
- Rolul suprafetelor si interfetelor in materiale structurate;
- Corelatii electronice si interactiuni magnetice;
- Modelarea si simularea dinamicii microstructurilor prin fizica computationala;
- Interactia campurilor de radiatii cu materia la scara micro si nano.

B. NANOSTRUCTURI SI MATERIALE MULTIFUNCTIONALE**B1. Materiale pentru energie**

- generare, conversie, transport si stocare;
- aliaje si compozite pentru reactori de fuziune si fisiune nucleara.

B2. Materiale pentru aplicatii in industrii de inalta tehnologie

- materiale pentru electronica de inalta frecventa;
- materiale pentru optoelectronica, electronica transparenta, spintronica;
- materiale pentru memorii nevolatile;
- senzistica pentru automatizari si control.

B3. Materiale pentru aplicatii in biomedicina si protectia mediului

- materiale biocompatibile si /sau biofunctionale;
- bio-senzori, senzori chimici si (foto)-catalizatori.

Programul Nucleu are la baza directiile de cercetare stabilite prin Planul de Dezvoltare al INCDFM, prezentate mai sus si aprobat in forurile de conducere ale institutului, precum si recomandarile continute in raportul de evaluare intocmit de catre o comisie de experti independenti in aprilie 2012. Mentionam faptul ca la exercitiul de evaluare comisia a fost formata din 5 experti din strainatate, presedintele comisiei fiind presedintele executiv al E-MRS din aceea perioada, Prof. Rodrigo Martins. Comisia a notat planul de dezvoltare cu 4.7 din maxim 5, iar institutul a obtinut calificativul A+ in urma evaluarii. Recomandarile expertilor se refera in mod expres la cresterea sinergiei in interiorul institutului, la potentarea si promovarea de teme multidisciplinare, dar si la depunerea de eforturi sporite in directia dezvoltarii de aplicatii si a transferului tehnologic. Ca urmare, programul Nucleu propus pentru perioada urmatoare isi propune sa continue eforturile depuse in ultimii 3 ani in vederea abordarii sinergice a unor teme multidisciplinare si a cresterii capacitatii de inovare si transfer tehnologic.

Programul Nucleu dezvolta deci cercetari fundamentale si aplicative pe tematicile cuprinse in planul de dezvoltare, utilizand la maxim expertiza si infrastructura deja existenta in INCDFM. Pentru realizarea programului Nucleu sunt propuse 3 proiecte (a se vedea la punctul 9 al prezentei propuneri), care acopera intreg ciclul de cercetare, de la elaborarea de modele teoretice predictive si simulari computationale, pana la realizarea de demonstratori si initierea unor noi metode de sinteza si analiza.

Prin proiectele propuse si tematicile aferente, programul Nucleu urmareste urmatoarele:

-generarea de cunoastere noua in domeniile de activitate ale INCDFM, cu precadere in domeniul fundamental al intelegerii fenomenelor care au loc in materia condensata, precum si in cercetarea aplicativa legata de sinteza si caracterizarea materialelor functionale si nanomaterialelor;

-testarea de noi idei si teme de cercetare la frontiera cunoasterii actuale, cu scopul generarii masei critice de cunoastere si expertiza care sa permita ulterior dezvoltarea temelor respective in propuneri de proiecte la viitoarele competitii organizate in cadrul programelor nationale si internationale (PN 3, ROSA, ERA-NET, Horizon 2020, ELI-NP etc.);

-cresterea in continuare a nivelului de competitivitate, competenta si expertiza al INCDFM in domeniul sau de activitate;

-valorificarea la maxim a resurselor existente, atat umane cat si materiale, cu referire speciala la infrastructura achizitionata in ultimii 7-8 ani in special prin cele 2 mari proiecte POS-CCE pe care INCDFM le-a derulat in perioadele 2009-2011 si 2014-2015;

-intarirea sinergiei interne intre grupurile de cercetare din INCDFM in scopul valorificarii la maxim a expertizei lor si al cresterii multidisciplinaritatii/interdisciplinaritatii temelor de cercetare abordate in programul Nucleu;

-cresterea vizibilitatii nationale si internationale a institutului prin valorificarea maxima a rezultatelor obtinute (publicatii in jurnale internationale de prestigiu, participari – pe cat posibil cu lectii invitate – la conferinte internationale pe domeniile de activitate ale institutului, extinderea parteneriatelor si colaborarilor la nivel national si international, extinderea si intarirea colaborarilor cu mediul privat din economie, intarirea efortului catre dezvoltarea de aplicatii brevetabile);

-cresterea componentei aplicative a cercetarii cu scopul declarat de a duce anumite aplicatii la un nivel de maturitate suficient de ridicat incat sa fie atractive pentru transfer catre mediul economic, fie utilizand mecanismele financiare puse la dispozitie prin programul POC (parteneriate pentru transfer de cunostinte si dezvoltarea de start-up-uri si spin-off-uri inovative), sau prin contracte directe cu potentiali utilizatori;

-intensificarea eforturilor de formare de personal inalt calificat prin: angajare de tineri absolventi in domenii precum Fizica, Chimie, Inginerie, Informatica, Biologie; angajarea de personal la nivel post-doc pentru acoperirea unor pozitii considerate deficitare; angajarea de personal calificat pentru dezvoltarea de aplicatii, transfer tehnologic si activitate de marketing al rezultatelor cercetarii.

Tematicile ce vor fi abordate in cadrul programului Nucleu, precum si scopurile avute in vedere prin derularea sa, corespund cu prevederile Strategiei Nationale in domeniul Cercetarii, Dezvoltarii si Inovarii pentru perioada 2014-2020. Astfel, temele de cercetare ce vor fi abordate in cele 4 proiecte propuse in cadrul programului Nucleu se incadreaza in urmatoarele specializari inteligente sau prioritati nationale din Strategie:

- **ECO-NANO-TEHNOLOGII ȘI MATERIALE AVANSATE**

Prin domeniul sau de activitate, INCDFM se incadreaza perfect in aceasta specializare inteligenta. Materialele avansate functionale constituie baza aplicatiilor de inalta tehnologie din industrii de varf precum electronica, transporturi, energetica, aparare, etc. La nivel mondial se fac eforturi pe cateva

directii principale: 1) miniaturizarea anumitor componente ceea ce implica studiul efectelor de dimensiune in materiale functionale; 2) generarea si caracterizarea de sisteme cu dimensionalitate redusa si cu functionalitati utile in aplicatii high-tech (ex. gaz 2D de electroni la interfete; sisteme 2D similare grafenei, nanofire, etc.); 3) reducerea amprentei de carbon a tehnologiilor utilizate in obtinerea materialelor avansate si a aplicatiilor aferente lor; 4) inlocuirea materialelor deficitare cu altele abundente in natura; 5) scaderea costurilor de productie cu scopul de a face anumite aplicatii accesibile pentru cat mai multa lume (ex. „casa verde”); 6) dezvoltarea de sisteme inteligente de tip „cladire inteligenta” sau „oras inteligent”, care necesita materiale avansate pentru senzori, comunicatii, stocare de date, etc.

- **TEHNOLOGIA INFORMAȚIEI ȘI A COMUNICAȚIILOR, SPAȚIU ȘI SECURITATE**

Si la aceasta specializare inteligenta INCDFM isi poate aduce contributia dezvoltand materiale si aplicatii pentru comunicatii fara fir, pentru stocarea informatiei (memorii nevolatile), pentru diferite tipuri de senzori utilizabili in aplicatii de securitate (detectie de substante interzise, protectie de perimetre, determinari fizico-chimice in criminalistica etc.) sau de industrie aerospatiale si de aparare (ex. detectie de IR, microunde, etc.)

- **ENERGIE, MEDIU ȘI SCHIMBĂRI CLIMATICE**

Este un domeniu relansat in INCDFM in ultimii ani. Se pot aduce contributi considerabile pe urmatoarele directii: 1) surse regenerabile de energie, cum ar fi celule solare pe baza de efect fotovoltaic folosind materiale noi, abundente in natura si tehnologii de cost redus; celule de combustie bazate pe electroliti solizi; 2) materiale pentru stocare de energie cum ar fi nanocompozite pentru supercapacitori si baterii cu timp de viata indelungat si capacitate mare de stocare de sarcina electrica sau materiale pentru stocare de hidrogen; 3) materiale pentru reactoare nucleare de fisiune sau fuziune (in stransa relatie cu proiectul ITER) 4) (bio) senzori pentru combaterea poluarii, inclusiv pentru prevenirea utilizarii in exces a pesticidelor si ierbicidelor (aici se poate face legatura si cu domeniul de specializare inteligenta intitulat **BIOECONOMIE**)

- **SĂNĂTATE**

Exista expertiza incipienta si intentia ferma de a dezvolta cercetarile in domeniul materialelor biocompatibile, al nanomaterialelor utilizate in livrarea controlata a medicamentelor, precum si in dezvoltarea de materiale pentru senzori cu aplicatii in medicina. Este un domeniu interdisciplinar care, pentru a se dezvolta cu sanse reale de succes in competitii de proiecte, necesita asamblarea unor echipe complexe de fizicieni, ingineri, chimisti, biologi si intarirea colaborarilor cu unitati medicale pentru efectuarea testelor specifice.

- **TEHNOLOGII NOI ȘI EMERGENTE**

INCDFM poate contribui in stransa relatie cu participarea Romaniei la unele mari proiecte de infrastructura care se dezvolta in prezent atat in tara cat si in alte regiuni ale Europei. Exemplul cel mai la indemana il constituie proiectul ELI-NP, la care INCDFM poate contribui cu cercetari privind obtinerea unor materiale pentru acoperiri optice rezistente la fluxuri intense de radiatie laser, la realizarea de tinte pentru experimentele avute in vedere in cartea alba a ELI-NP, sau la punerea la punct a ariei experimentale de studii ale materialelor folosind spectroscopii de pozitroni. INCDFM poate aduce contributii, prin studii avansate de material sau de dispozitiv, si la dezvoltarea de noi detectori pentru CERN (colaborarea RD50), la elaborarea de noi tehnici de analiza utilizand radiatia sincrotron (ELETTRA, C-ERIC), sau la impactul pe care il au diferite tipuri de radiatie asupra materialelor cu impact tehnologic in diferite sectoare industriale.

- **CERCETARE FUNDAMENTALA SI DE FRONTIERA**

Este un domeniu prioritar la nivel national care intereseaza toate celelalte specializari inteligente sau prioritati nationale. Practic, orice cercetare incepe cu studii fundamentale, la granita cunoasterii actuale, pentru a intelege noi fenomene, a dezvolta modele predictive pentru sinteza de noi materiale si structuri, sau pentru a previziona modul in care diferite aplicatii raspund la modificari ale stimulilor externi. Cercetarea fundamentala este cea care ofera cunoasterea necesara pentru avansul catre aplicatii concrete. In primul rand, aici INCDFM a dovedit in repetate randuri ca poate aduce contributi determinante in intelegerea fenomenelor fizice la nano-scala, la nivelul suprafetelor (cataliza si fotocataliza) sau al interfetelor (proprietati derivate din imparitate de sarcina la interfete, inginerie de stess mecanic, etc.), precum si la intelegerea interactiei dintre materia sub diferite forme, in special solida,

si diferite forme de radiatii sau constrangeri de mediu: temperaturi foarte ridicate sau foarte joase, presiuni extrem de ridicate sau, dimpotriva, domeniul vidului ultraint. (De mentionat ca INCDFM este singurul institut din tara unde domenii de vid de ordinul 10^{-10} sau chiar 10^{-11} mbar sunt obtinute frecvent.)

2. Modul de derulare al programului:

2.1. Descrierea activităților (utilizând și informațiile din rapoartele de fază, Anexa nr. 9)

Proiect 1: Fenomene si procese fizico-chimice in sisteme nanometrice complexe, suprafete si interfete;

In cadrul Proiectului 1 „*Fenomene si procese fizico-chimice in sisteme nanometrice complexe, suprafete si interfete*” din cadrul programului nucleu *Multidisciplinaritate si Sinergie in Domeniul Fizicii Starii Condensate si al Materialelor Functionale* ne-am propus sa desfasuram studii aprofundate privind fenomenele fizico-chimice care au loc in sisteme nanometrice complexe, pe suprafete sau la interfete, cu focalizare pe materiale functionale care au potential aplicativ in domenii industriale de inalta tehnologie, energetica, spatiu si securitate, protectia mediului si prevenirea poluarii, precum si in stiintele vietii.

In cadrul proiectului am predat in 2016 13 faze; am testat si verificat idei noi, inovatoare, aria de activitati desfasurate fiind subscrisa in special cercetarii fundamentale. Fazele din 2016 au fost legate de studiul efectelor de dimensiune in nano-obiecte si sisteme cuantice, de corelatiile electronice si de interactiunile magnetice, de rolul suprafetelor si interfetelor in materiale nanostructurate, de interactia dintre materie si stimuli externi la micro si nanoscala. Aceasta diversitate de tematici abordate conduce la dificultatea de grupare a fazelor, pe care o putem imagina fie pe baza proceselor si fenomenelor studiate, fie clasificand materialele studiate dupa anumite criterii (de exemplu structura, dimensionalitate, proprietati, aplicatii).

O directie de studiu a fost legata de problematica fazelor magnetice si feromagnetice, ca si de structura electronica, magnetica si legatura cu proprietatile structurale.

Astfel, in cadrul fazei **Structura electronică și magnetică a semiconductorului magnetic diluat Mn/Ge(001)** am urmarit sa caracterizam semiconductorul diluat feromagnetic (Ge,Mn) obținut în urma depunerii epitaxiale a Mn pe Ge cu tehnici accesibile la facilitățile radiației de sincrotron, prin spectromicroscopie de fotoemisie. Am fost de asemenea interesati in obținerea de informații suplimentare privind structura, reactivitatea și proprietățile electronice ale acestor compuși cu temperatură Curie ridicată. Rezultatele raportate în această fază fac referire la o gamă largă de tehnici și metode de analiză a proprietăților structurale (microscopie electronică, difracție de raze X), magnetice (efect Kerr), de natură chimică (spectroscopie de fotoelectroni), sau metode combinate (spectroscopie de fotoelectroni + corodare) pentru analiză compozițională în volum, spectroscopie de fotoelectroni cu rezoluție de spin pentru proprietăți magnetice, spectro-microscopie. Rezultatele de difracție de raze X, microscopie electronică și de spectroscopie de fotoelectroni însoțită de etape de corodare relevă existența unor compuși Mn-Ge (de tipul Mn_5Ge_3), pe grosimi de ordinul a zeci de nm, pana la 200-400 nm, dimensiunea și forma acestora (insule/strat continuu) depinzând de grosimea estimată a stratului de Mn depus și de temperatura la care este mentinut substratul in timpul depunerii. În plus se evidențiază și faptul că există un gradient al concentrației de Mn în interiorul acestor compuși. Datele însoțite de corodare sau cele de TEM nu par să indice existența vreunui strat de Mn metalic, deși există o linie din spectrul de difracție la incidență razantă care nu a putut fi asociată vreunei alte faze. Măsurătorile de spectromicroscopie relevă existența unei neomogenități nu foarte accentuate la suprafața probei, care nu poate fi pusă totuși pe seama schimbării stării chimice a Mn. Din spectrele de fotoemisie se relevă faptul că starea acestuia rămâne neschimbată și că un eventual proces de oxidare ajunge să afecteze doar Ge, Mn fiind într-o măsură protejat de imersarea în matricea de Ge.

Faza **Studii privind proprietatile structurale si magnetice ale structurilor Ni/Ge(001)** a fost dedicata elucidarii mecanismelor de crestere a filmelor subtiri de Ni pe substraturi de Ge(001) si optimizarea depunerii nanofilmelor de Ni, cu caracterizare structurala si magnetica, in vederea posibilei utilizari a acestui sistem in tehnologii cu Ge ca inlocuitor avantajos pentru Si, si Ni ca material feromagnetic ce s-ar putea incadra in aplicatii de spintronica. Compusii de Ni-Ge sunt de mare interes aplicativ pentru ca pot fi utilizati in nanotehnologie pentru diferite aplicatii. Ge este mai convenabil ca pret si are o mobilitate mai buna decat Si si o banda interzisa directa, ceea ce il face un material cu potential favorabil pentru detectori de radiatii sau diverse dispozitive microelectronice. De asemenea, Ni si Ge formeaza compusi cu diferite proprietati magnetice utilizabile pentru a crea interfete magnetice intre un metal si un semiconductor ce nu prezinta un camp electric la interfata, ceea ce duce la imbunatatirea injectiei de purtatori cu

polarizare de spin. Am preparat probele prin depunerea prin MBE a nano-straturilor de Ni pe substrat de Ge(001) la diferite temperaturi ale substratului (100, 200, 300 si respectiv 400 °C). Probele au fost caracterizate folosind tehnici *in situ*: XPS si LEED, cat si tehnici *ex situ* efect magneto-optic Kerr (MOKE), difractie de raze X (XRD) si structura fina extinsa a limitei de absorbtie a razelor X (EXAFS). Toate metodele de caracterizare a structurii au indicat difuzia Ni in matricea substratului. Masurarile EXAFS indica formarea la interfata substrat/strat depus a fazei metastabile cubice cu volum centrat a Ni. Masurarile de magnetizare pun in evidenta comportamentul magnetic al probelor depuse pe substrat incalzit la 100 si 400 °C, precum si absenta curbei de histerezis in masurarile pe probele depuse pe substrat incalzit la 200 si 300 °C .

In cadrul fazei **Cartografierea la scala nanometrica a distorsiunilor structurale remanente in heterostructuri epitaxiale. Corelatii cu proprietatile electrice si magnetice ale heterostructurilor** am urmarit determinarea distorsiunilor remanente in retea cristalina a straturilor subtiri feroice si explorarea corelatiilor cu proprietatile electrice si magnetice ale acestora. In acest scop am urmarit sa punem in evidenta relaxarea retelei cristaline in vecinatatea interfetelor si a defectelor structurale in filme subtiri epitaxiale utilizand tehnici avansate de procesare digitala cantitativa a imaginilor de microscopie electronica de inalta rezolutie. Am pornit de la observatia ca materialele oxidice cu proprietati feroice (e.g. PZT, BCZT, LSMO) sunt exemple tipice de materiale ale caror proprietati macroscopice sunt direct influentate de structura cristalina a acestora si de posibilele distorsiuni microstructurale care pot aparea la scala nanometrica sub actiunea unor constrangeri mecanice. In cazul materialelor feromagnetice relatia dintre distorsiunile structurale si proprietatile magnetice este data de fenomenul de magnetostriectiune, consecinta a anizotropiei magnetocristaline si a tendintei de minimizare a energiei libere a sistemului aflat in camp magnetic prin modificarea peretilor domeniilor feromagnetice si prin distorsionarea structurii cristaline in sensul reducerii unghiului dintre directia de usoara magnetizare si directia campului magnetic aplicat. In cadrul fazei au fost examinate doua sisteme de straturi subtiri epitaxiale cu grad de complexitate crescator: straturi simple de BCZT (Ba-Ca-Zr-Ti-O) crescute epitaxial pe substrat de SrTiO₃ (STO) si structuri bi-strat de PZT/SRO crescute epitaxial pe STO. Straturile au fost depuse prin tehnica depunerii laser pulsate (PLD) si analizate din punct de vedere morfo-structural prin microscopie electronica de inalta rezolutie prin transmisie (HRTEM) folosind microscopul electronic JEM ARM 200F si procesare cantitativa a imaginilor HRTEM folosind metoda Analizei Fazei Geometrice (GPA). Cartografiile prezinta in general o deformare de intindere ($\epsilon_{xx}, \epsilon_{yy} > 0$) a retelei cristaline corespunzatoare filmului subtire de BCZT in raport cu substratul de STO luat ca referinta. Desi, data fiind diferenta dintre parametrii de retea ai celor doua structuri, substratul de STO exercita o actiune compresiva asupra filmului de BCZT, am pus in evidenta faptul ca **natura distorsiunilor depinde de grosimea filmului, dependentă nefiind una monotona**. Variatia naturii si valorilor numerice ale distorsiunilor structurale cu grosimea filmelor subtiri indica o **dependentă complexă**, in care nepotrivirea de retea intre film si substrat este numai **unul** dintre factori. Un studiu similar a fost desfasurat pe o structura mai complexa, implicand doua straturi subtiri epitaxiale, PZT si SrRuO₃ (sau SRO), depuse pe acelasi tip de substrat, STO (001). Seria de probe studiata a constat in straturi de PZT cu grosime crescatoare (5, 20, 50, 150, 250 nm) depuse peste un strat tampon de SRO mentinut la o grosime constanta de 20 nm. Ca si in cazul anterior, se poate constata o dependentă complexă a distorsiunilor remanente in SRO si PZT in functie de grosimea filmelor de PZT. Interactia dintre cele doua straturi subtiri in prezenta substratului precum si procesele de relaxare elastica cu formarea de dislocatii si domenii structurale in PZT face ca alura curbelor sa nu mai fie la fel de simetrica precum in cazul BCZT/STO. Curbele pastreaza un comportament preponderent nemonoton, cu variatii mari in special in cazul filmelor foarte subtiri (5-20 nm).

Scopul general al studiului intreprins in faza **Investigarea proprietăților magnetice si electrice in compusi cu structura de dublu perovskit cu potential in aplicatii PV** este investigarea proprietăților termodinamice, magnetice si feroelectrice ale unor compusi cu structura dublu perovskit, din familia A₂TM₂O₆, unde TM este un metal de tranzitie. Obiectivul principal al fazei a fost sinteza si optimizarea Ce₂CoMnO₆ prin metoda ceramica pornind de la precursori oxidici. După cunoștințele autorilor studiului, bazate pe datele din literatura, acest compus nu a mai fost sintetizat si realizarea sa este o premiera. După sinteza, am realizat caracterizarea structurala a compusilor obținuți prin difracție de raze X. Studiul a fost centrat pe investigarea proprietăților magnetice, de transport electric si termodinamice la temperaturi joase de pana la 1.8 K si câmpuri magnetice intense de pana la 14 T. In plus, am investigat proprietățile feroelectrice ale compusului la temperaturi joase, in interiorul fazei ordonate magnetic. Am gasit ca Ce₂CoMnO₆ are structura cubica. Măsurătorile indică ordonarea feromagnetica a straturilor sub $T_c = 190$ K si o interrelaționare complexa intre feromagnetism si antiferomagnetism la temperaturi joase. Măsurările de căldura specifica confirma faptul ca in cea mai mare parte entropia de sub anomalie provine de la feromagnetism. Magnetizarea negativa in ZFC, dependentă de câmpul magnetic a temperaturii de crossover coroborata cu histerezisul magnetic indica contribuții metamagnetice. In plus măsurările de polarizare electrica indica faptul ca sistemul este si feroelectric la temperaturi

joase cu valori însă foarte mici ale polarizării electrice. Datorita polarizării foarte mici măsurările de polarizare electrica remanenta nu sunt încă relevante si in prezent încercam sa le rafinam. Interesant de remarcat sunt caracteristicile dielectrice ale compusului ce nu arata pierderi nici la câmpuri electrice foarte mari si timpi lungi de măsură.

Modelarea proprietatilor feroelectrice in straturi subtiri de oxizi ternari ABO_3 si AB_2O_5 ($A, B =$ metale de tranzitie nd) prin metode computationale in cadrul Density Functional Theory a facut obiectul altei faze predate. Pornind de la observatia ca stabilitatea vectorului polarizare electrica P este un factor critic in functionarea noilor generatii de dispozitive electronice care utilizeaza straturi din materiale feroelectrice cu grosimi nanometrice, ne-am propus ca in cadrul fazei sa determinam dependenta polarizarii electrice spontane in straturi subtiri de $PbTiO_3$ in faza tetragonala, in functie de grosimea stratului, fara (si cu) relaxarea pozitiiilor atomice, prin realizarea de calcule utilizand metoda fazei Berry implementata in cadrul teoriei functionalei de densitate electronica (DFT). Polarizarea spontana (cea obtinuta in urma masurarilor experimentale) este definita doar ca diferenta a polarizarilor calculate pentru doua stari: starea feroelectrica si o stare de referinta care este de obicei aleasa ca starea centrosimetrica. Tinand cont ca procedeul de calcul exact al polarizarii pentru un material implica in fapt realizarea mai multor secvente laborioase de calcule, un al doilea obiectiv al acestei faze de proiect a constat in verificarea unei metode originale, mai eficienta ca efort computational, pentru determinarea polarizarii. Am facut calcule pe heterostructuri de $SrTiO_3$ (STO) si $PbTiO_3$ (PTO), de tipul n-STO si m-PTO, unde n si m reprezinta numarul de straturi (celule unitate). Raportul n:m are valorile 4:1, 4:2, 4:3, 4:4, 4:6, 4:8, 4:10 si 4:12, ceea ce acopera domeniul de grosimi de aprox. 0.5 - 6 nm pentru PTO cu suprafata (001).

In cadrul fazei **Modificarea parametrilor critici in supraconductori iradiati cu protoni** ne-am focalizat studiile pe influenta iradierii asupra proprietatilor supraconductorilor prin: i) marirea dezordinii cristaline; ii) crearea de defecte susceptibile sa devina centri de fixare a liniilor de camp; iii) stimularea imprastierii interbanda a purtatorilor de sarcina, interesul aplicativ existand in masura in care bilantul proceselor mentionate conduce la imbunatatirea proprietatilor de transport in cabluri supraconductoare. Ca exemplu a fost ales materialul MgB_2 sintetizat prin SPS, iar ca particula de iradiere – protonul (energie cintetica 11.3 si 13.2 MeV, si fluente pana la 3×10^{17} p/cm²). Am gasit ca iradierea influenteaza slab proprietatile supraconductoare, dar produce efecte semnificative asupra proceselor de fixare a liniilor de camp (pinning) produse de centrul de ancorare a vortexurilor care sunt de fapt defecte extinse create de iradiere. Experimentele raportate in faza indica influenta marginala a iradierii asupra temperaturii critice ($\Delta T_c = -0.6$ K pentru proba iradiata cu cei mai energetici protoni). Calcule numerice raportate in literatura arata ca la fluente mari distributia spatiala omogena a defectelor create devine instabila in sensul ca defectele incep sa se concentreze in anumite zone lasand alte zone libere de defecte. Astfel, materialul va prezenta regiuni cu densitate mare de defecte unde supraconductia este aproape suprimata dar care asigura o fixare eficienta a liniilor de camp si regiuni unde defectele aproape lipsesc dar care furnizeaza o buna ecranare supraconductoare. Magnetizarea probelor iradiate in functie de campul magnetic arata o crestere consistenta a instabilitatilor magnetice reflectate in salturi de flux care persista pana la temperaturi mai mari de 20 K. In probele neiradiate acest depinning catastrofal se manifesta doar in jurul temperaturii heliului lichid. Am gasit de asemenea ca densitatea de curent critic creste cu cresterea fluentei de iradiere. Creserea densitatii de curent este atribuita formarii de defecte precum clusterii, bucele de vacante si dislocatiile care sunt efective pentru reseaua liniilor de flux. Imbunatatirea fixarii liniilor de camp prin iradiere cu protoni poate fi o metoda de interes, pentru dezvoltarea aplicatiilor in medii cu flux de protoni mai ales ca elementele constitutive nu prezinta o activare mare si de durata.

O alta directie de studiu pe care am dezvoltat-o in cadrul Proiectului 1 este cea legata de proprietatile catalitice si fotocatalitice ale materialelor, aplicatii in biologie.

Astfel, in faza **Modificarea proprietatilor fotocatalitice in functie de parametri de sinteza a filmelor /straturilor subtiri de semiconductori oxidici** am urmarit obtinerea de sisteme de oxizi ai metalelor de tranzitie cu „decoratii” (=dopati pe suprafata exterioara), cu proprietati fotocatalitice imbunatatite fata de cei „nedecorati”. Studiul raportat in faza s-a axat pe sinteza chimica a compozitelor de $ZnO-CdS$ si caracterizarea complexa a acestora. Sinteza compozitelor constă în două etape: i) prepararea nanoparticulelor de CdS prin reacția chimică dintre $Cd(NO_3)_2$ și Na_2S și ii) generarea microparticulelor de ZnO prin reacția dintre $Zn(NO_3)_2$ și $NaOH$, în prezența nanoparticulelor de CdS . Caracterizarea structurala (RDX), morfologica (SEM), din punctul de vedere al starilor chimice ale elementelor constitutive (XPS), optica (spectroscopie de reflexie) si fotocatalitica (folosind ULVAC-RIKO PCC2) a probelor preparate a aratat ca creșterea activității fotocatalitice pentru $ZnO-CdS$, nanostructuri binare, se datorează suprimării recombinării perechilor electron-gol foto-generate dar si datorita îmbunătățirii absorbției luminii in domeniul vizibil.

Cercetarile raportate in faza **Nanomateriale cu proprietati magnetice sau fotocatalitice pentru aplicatii in terapii antitumorale prin hipertermie si/sau procese redox** au urmarit: i) sinteza de nanoparticule de Fe_3O_4 prin metode precum precipitare, coprecipitare si sol-gel ; ii) sinteza de TiO_2 prin precipitare din alcoxizi de titan, in diferite conditii fizico-chimice ; iii) caracterizarea structurala, morfologica, magnetica si determinarea citotoxicitatii oxizilor de fier ; iv) caracterizarea structurala, morfologica si determinarea activitatii fotocatalitice pentru nanoparticulele de TiO_2 si v) identificarea unor proceduri de sinteza cu potential pentru obtinerea de nanomateriale cu proprietatile dorite. Punctul de plecare al acestui tip de cercetari este faptul ca nanomaterialele cu proprietăți magnetice și fotocatalitice controlabile prin procesul de sinteză și activate prin acțiunea unor agenti fizici precum campuri magnetice sau radiatii ultraviolete prezintă potențial ridicat pentru multiple utilizări in aplicații biomedicale precum terapii antitumorale, tehnologii antimicrobiene si metode de detecție, monitorizare sau separare in vitro sau in vivo. In faza am realizat sinteza $Fe_3O_4/\gamma-Fe_2O_3$ prin mai multe metode: metoda precipitarii, a coprecipitarii si sol-gel, si am preparat fluide magnetice. Am caracterizat materialele preparate prin XRD, TEM, spectroscopie Mossbauer, masurari de histerezis magnetic si de incalzire-racire ale suspensiilor magnetice ale probelor in camp magnetic variabil. Am efectuat apoi teste de citotoxicitate.

Detectarea de compusi chimici cu efect inhibitor asupra activitatii proteazomului 20S, enzima ale carei functii de reglate reprezinta o cauza a multor anomalii medicale este obiectivul principal al fazei **Studiul transferului de sarcina si al reacțiilor chimice in sisteme biologice**. In tematica nanoparticulelor magnetice si a nanomaterialelor cu proprietati fotocatalitice si/sau magnetice am abordat sinteza si caracterizarea unor nanomateriale cu potential de a fi folosite in terapii antitumorale bazate pe hipertermie si/sau procese oxidative, asa cum s-a facut si in faza descrisa anterior. Pentru sinteza heterostructurilor am folosit metode chimice in solutie combinate cu metode neconventionale (camp de microunde, sonochimie). Analizele asupra produsilor de sinteza privesc structura, forma, dimensiunea, suprafata specifica, stabilitatea coloidala, proprietatile magnetice, optice, fotocatalitice, biocomaptibilitatea, implicand expertiza si aparatura din mai multe laboratoare si grupuri din institut.

Studiul fenomenelor la scară mezoscopica reprezinta o alta directie de studiu in cadrul prezentului proiect.

Faza **Proprietati topologice ale fosforenei manifestate in regim de transport cuantic** a vizat in primul rand elucidarea unor proprietati ale spectrului de benzi electronice ale fosforenei si analiza fenomenelor de conductie in banda plata, cu identificarea efectului invaziv al contactelor de masura in configuratie Hall. In plus am pus in evidenta efecte superradiative in banda cuasi-plata a fosforenei. Scopul fazei l-a constituit studierea proprietatilor mezoscopice ale rețelei de fosforena in camp magnetic perpendicular. Am demonstrat ca ruperea bipartitismului da nastere asimetriei electron-gol in spectrul energetic. Deasemenea proprietatile topologice ale starilor de margine in banda zig-zag de fosforena au fost analizate din perspectiva degenerarii, localizarii si dispersiei in camp magnetic. Transportul cuantic a fost analizat prin simularea unui dispozitiv Hall cu patru terminale. Utilizand formalismul Landauer-Büttiker am scos in evidenta comportamentul disipativ al starilor de margine topologice.

In faza **Controlul optic si electric al starilor excitonice si biexcitonice** am studiat din punct de vedere teoretic manipularea optica a starilor excitonice pentru un dot cuantic „impurificat” cu un atom de Mn. Precizam ca tehnicile experimentale actuale permit includerea controlata a impuritatilor magnetice în interiorul doturilor cuantice active optic, atât la nivelul concentratiei cât și la nivelul pozitiei în interiorul dotului. Din punctul de vedere al aplicatiilor, controlul optic al impuritatilor magnetice localizate reprezintă o problema de mare importanta în vederea realizarii de dispozitive pe baza de stari cuantice (qubits). În acest context timpii mari de coerenta a spinului fac din ionul de Mn un candidat promitator pentru implementarea circuitelor de memorie cuantica. Pentru a obtine nivelele uniparticula de tip gol usor (LH) din banda de valenta am ales un dot cilindric. Un prim rezultat preliminar consta în analiza ponderilor starilor uniparticula de tip gol greu (HH) si LH ale primilor doi dubleti Kramers din banda de valenta a unui dot cuantic cilindric in functie de înălțimea dotului pentru o raza fixata. Am calculat și analizat apoi spectrele excitonice de absorbtie pentru diferite pozitii ale atomului de Mn. Pe baza metodei ecuatiei Master am calculat probabilitatile de ocupare ale celor patru stari excitonice relevante pentru diferite pozitii ale impuritatii de Mn. Perioada oscilatiilor Rabi este cu atât mai mare cu cat atomul de Mn este positionat mai spre marginea cilindrului. Aceste rezultate se explica prin faptul ca pozitia Mn de-a lungul axei cilindrului influenteaza amestecul dintre excitonii LH, putandu-se identifica doua regimuri: in primul regim excitonii LH în absenta interactiei sunt cuplati cate patru, situatie care nu este favorabila prepararii unei stari cu spin stabil si nici pentru studiul oscilatiilor Rabi. Al doilea regim este cel in care pozitia Mn este suficient de aproape de una din bazele cilindrului astfel incat interactia e-Mn sa fie neglijabila, in timp ce interactia h-Mn (care este de aproape patru ori mai mare decat cea e-Mn) inca se poate neglijata și amesteca doar doua stari excitonice. Spre deosebire de primul regim, al doilea regim este favorabil studiului dinamicii Rabi dintre excitonii LH activi si inactivi optic. În cadrul etapei am descris si dinamica biexcitonilor micsti ai paturilor **s** și **p** în functie

de pozitia ionului de Mn in dot, obținând oscilații Rabi între două stări biexcitonice al căror amestec se datorează strict interacției de schimb gol-Mn. Am inclus apoi și efectele de relaxare intrabanda, relaxarea interbanda fiind încă lentă în comparație cu restul proceselor (timpul lor de viață fiind de ordinul nanosecundelor). Pentru o singură configurație dot+Mn am identificat oscilațiile puternic amortizate cauzate de procesele de relaxare ale golurilor cu conservarea spinului (cele mai rapide procese în IR).

Cercetarea porneste de la calculul forțelor fizice (și a presiunii), în cadrul efectului Casimir.

În aceeași categorie, de fenomene la scară mezosopică, putem încadra și faza **Forța cuantică de respingere între pereți metalici sau semiconductori. Modele electronice de fractură mecanică**. Aplicațiile vizează metalele și semiconductorii, în particular forța de rupere, sudura la rece a metalelor (de interes pentru aplicațiile spațiale sau de dispozitive mecanice funcționând în vid ultraînalt). Se alege un profil de potențial care modelează sistemul și se rezolvă ecuația Schrödinger, se determină concentrația de electroni, și se calculează presiunea între cele două plăci, care se compară cu presiunea Casimir, calculată în teoria cuantică a câmpului. Din calculele prezentate în faza rezultă că valoarea absolută a forței cuantice la distanțe de ordinul Ångströmilor sau nanometrilor este mult mai ridicată decât forța Casimir, deci „pericolul” unei comprimări de ordinul TPa a materialului dispare. Pentru calcule la distanțe mezoscopice, precizia calculatoarelor actuale nu este suficientă. O altă consecință a calculelor din acest studiu este o demonstrație intuitivă a faptului că metalele prezintă ductilitate, iar semiconductorii și izolatorii sunt materiale casante. De asemenea, cazurile practice analizate (pentru metale) se plasează în vecinătatea punctului unde presiunea cuantică își schimbă și schimbă semnul.

Obiectivul studiilor raportate în faza **Mecanisme activate termic implicate în formarea nanocristalelor de LiYF₄ dopate cu pamanturi rare prin metoda sol-gel** a fost studiul mecanismelor activate termic implicate în formarea nanocristalelor de LiYF₄ dopate cu pamanturi rare prin metoda sol-gel. Pentru atingerea obiectivului fazei s-au sintetizat pulberi nanocristaline de LiYF₄ dopate cu (Yb,Er) folosind metoda sol-gel. În vederea studiului fenomenelor activate termic implicate în formarea acestora din xerogelul inițial (prin calcinare la diferite temperaturi) s-au folosit metode termogravimetrice (DTA) și analiza datelor obținute. În plus aceste date s-au corelat cu rezultate obținute din măsurări structurale (difracție de raze X) și morfologice (microscopie electronică SEM). S-a analizat cantitativ formarea nanocristalelor de LiYF₄ (energii de activare, entalpii de formare, mecanisme de creștere, etc). În cadrul fazei am sintetizat nanoparticulele de LiYF₄ dopate cu (Yb,Er) folosind metoda sol-gel. Analiza termică a xerogelului pulbere indică două etape de pierdere în greutate până la 330 °C. S-a realizat apoi caracterizarea morfologică și structurală prin măsurări XRD și SEM, după care s-a făcut analiza cinetică a cristalizării folosind diverse metode.

Proiect 2: Sinteza și caracterizarea materialelor nanostructurate, straturilor subțiri și heterostructurilor;

Conținutul științific al proiectului **Sinteza și caracterizarea materialelor nanostructurate, straturilor subțiri și heterostructurilor** este structurat în principal pe următoarele teme de cercetare:

- A. Dezvoltarea de noi materiale și structuri oxidice** cu proprietăți feroice, piezoelectrice, dielectrice, piroelectrice, magnetice sau semiconductoare.
- B. Sinteza și caracterizarea de materiale magnetice și supraconductoare cu potențial de aplicații.**
- C. Sinteza și caracterizarea de structuri cu dimensionalitate redusă 2D, 1D și 0D.**
- D. Sinteza și caracterizarea de compusi de tip halizi și calcogenizi cu potențial de aplicații.**

În cadrul acestui proiect, în cursul anului 2016 au fost realizate 20 de faze, distribuite relativ neuniform pe cele patru direcții. Acest lucru s-a datorat diferențelor de întindere, complexitate, și resurse umane între temele mari menționate mai sus. Pe de altă parte, multe dintre fazele realizate pot fi considerate ca situându-se la granița a două teme de cercetare. Cel mai la îndemână exemplu este prima fază de cercetare descrisă mai jos, în care nanofirele de ZnO sunt și materiale/structuri oxidice (Tema A) cât și structuri cu dimensionalitate redusă, 1D (Tema C). Alt exemplu este prima fază menționată la Tema B, în care materialul ce asigură matricea supraconductoare este un material oxidic cu structura de tip perovskit.

Astfel, în cadrul Temei A **Dezvoltarea de noi materiale și structuri oxidice** am sintetizat și caracterizat noi materiale și structuri oxidice cu diverse proprietăți și funcționalități.

În cadrul fazei **Sinteza chimică în mediu slab bazic a nanofirelor de ZnO pentru aplicații de tip tranzistori cu efect de câmp** s-au realizat următoarele: i) sinteza chimică a nanofirelor de ZnO și investigarea proprietăților morfologice, structurale și optice ale acestora; ii) fabricarea de electrozi micrometrici interdigitati prin fotolitografie, utilizați ulterior pentru contactarea unor nanofire singulare de ZnO prin litografie cu electroni; iii) caracterizarea electrică a nanofirelor singulare de ZnO și măsurarea acestora în configurația de tranzistor cu efect de câmp având poarta sub canalul semiconductor. S-a pus în evidență faptul că după nanofirele de ZnO releva semnăturile caracteristice acestui

semiconductor (faza hexagonală, lărgimea benzii interzise și banda de emisie în domeniul vizibil). Folosind electrozi interdigitați metalici de Ti/Au și prin utilizarea tehnicii EBL au fost contactate și măsurate în configurația de tranzistor cu efect de câmp având nanofire singulare de ZnO. Măsurătorile electrice realizate pe un singur nanofir de ZnO înainte și după pasivarea cu un strat de PMMA au evidențiat îmbunătățirea caracteristicilor după etapa de pasivare a starilor de suprafață (ex.: I_{ON}/I_{OFF} de la 10^6 la 4×10^6 ; V_T de la -4 V la -1 V; S de la 342 mV/decadă la 269 mV/decadă), tranzistorul fabricat operând în regim de putere mică și având timpi mici de comutare, caracteristici foarte importante pentru aplicații.

Faza *Proprietăți electrice în straturi feritice de tip CFO și NFO* prezintă studii ale proprietăților electrice ale straturilor epitaxiale de $SrRuO_3/NiFe_2O_4/SrRuO_3/SrTiO_3(100)$ (NFO/SRO/STO), $CoFe_2O_4$ (30nm)/ $SrRuO_3/SrTiO_3(100)$ (CFO/SRO/STO) și $CoFe_2O_4$ (30nm)/ $La_{0,7}Sr_{0,3}MnO_3/SrTiO_3(100)$ (CFO/LSMO/STO) obținute prin ablație cu fascicul laser pulsant. Pe aceste probe au fost efectuate măsurători curent-tensiune (I-V) și măsurători de capacitate, $tg\delta$ funcție de frecvență și temperatură. Analiza unei cantități foarte mari de date experimentale s-a realizat pe baza unor simulări și modelări teoretice. Răspunsul electric al straturilor subțiri de ferită este puternic influențat de tensiunea aplicată, de temperatură și de tipul electrodului inferior. Influența temperaturii și a tensiunii a fost studiată pe un strat de NFO cu grosimea de 5nm în care s-a observat prezența fenomenului de comutare rezistivă bipolară la temperaturi joase. Acest fenomen se poate explica prin prezența unui nivel energetic situat în vecinătatea benzii de valență dat de un defect din material care se comportă ca centru de captare pentru goluri. La temperatura camerei acest nivel este neutru și nu afectează conductivitatea electrică, însă induce fenomene de captare-emisie prin ciclarea tensiunii și prin scăderea temperaturii probei sub 150K. Fenomenul de comutare rezistivă se degradează prin încălzirea probei la 400K sau prin ciclări repetate ale tensiunii. În urma acestei degradări curbele I-V se modifică, valorile barierei de potențial extrase din măsurătorile I-V scăzând de la 0,2eV la 0,1eV. Curbele de dispersie a capacității/pierderi dielectrice sugerează prezența mecanismelor de relaxare date de sarcina spațială. În cazul straturilor de ferită de cobalt, tranzițiile de fază ale electrodului inferior afectează forma curbelor de variație a capacității funcție de temperatură la frecvențe mai mici de 1MHz. Măsurătorile efectuate la temperaturi mai mari de 390K sugerează faptul că straturile de CFO de 30nm au caracter semiconductor.

Faza *Investigarea structurală și a starilor de valență ale vanadiului în PZT dopat cu vanadiu și niobiu prin metodele TEM-EELS și RES* a fost realizată și beneficiind de colaborarea internațională în cadrul proiectului CERIC nr. 20152049 cu titlul: "Investigation of vanadium valence state in vanadium doped PZT by TEM-EELS, EPR and XANES/XAFS", aprobat în urma competiției din luna martie 2015 (Call 2). În cadrul fazei s-a reușit cu succes determinarea microstructurii ceramicilor de PZT cu diferite nivele de dopare cu vanadiu și niobiu prin tehnici de microscopie electronică de înaltă rezoluție precum și determinarea starilor de valență și a localizării ionilor de vanadiu în aceste ceramici prin tehnici spectroscopice RES în multifrecvență și EELS. Studiile TEM pe probele PZT:1%V+1%Nb, PZT:1%V+2%Nb și PZT:2%V au arătat prezența unor faze secundare asociate vanadiului. Imagistica spectrală EELS-SI a evidențiat o segregare a oxidului de vanadiu într-o matrice ce conține oxid de titan. Din studiile EELS au fost identificate stările de oxidare ale vanadiului ca fiind +4 în proba PZT:1%V+1%Nb, +3 în proba PZT:1%V+2%Nb și +5 în proba PZT:2%V. Studiile RES au identificat prezența ionilor V^{4+} izolați în rețeaua cristalină a PZT în cele trei probe co-dopate cu V și Nb. În proba PZT:2%V există ioni V^{4+} în faza cristalizată secundară PbV_2O_6 . Rezultatele obținute indică faptul că valența și distribuția ionilor de vanadiu este diferită în probele cu cantitate diferită de Nb_2O_5 adăugată în ceramica de PZT. Aceste rezultate urmează a fi corelate de către cercetătorii care au propus proiectul CERIC nr. 20152049 cu proprietățile piezoelectrice și feroelectrice ale ceramicilor, în vederea ajustării parametrilor de sinteză.

În cadrul fazei *Obținerea și caracterizarea fizico-chimică a unor straturi bioceramice cu proprietăți antimicrobiene* s-a reușit obținerea unui material bioceramic pe baza de hidroxiapatită dopată cu argint (AgHAp) și tetraciclină sau ciprofloxacină printr-o metodă simplă și la costuri mici (sol-gel), ce poate fi folosit pentru aplicații medicale. Caracterizarea fizico-chimică a acestor straturi a reprezentat cel de-al doilea obiectiv major al acestei faze și a demonstrat viabilitatea acestui nou material care ar putea fi folosit în viitor pentru diferite aplicații biomedicale. Rezultatele obținute au sugerat că cele două antibiotice au fost încorporate cu succes în structura Ag:HAp, formând astfel un strat compozit. Compoziția elementală a straturilor a fost investigată prin măsurători EDX, rezultatele arătând că toate elementele găsite sunt asociate cu structurile hidroxiapatitei dopate cu argint și a celor două antibiotice utilizate. De asemenea, grupările funcționale prezente în fiecare probă au fost identificate cu ajutorul spectroscopiei FTIR. Prezența antibioticelor a dus la apariția unor noi benzi de vibrație caracteristice compoziției lor chimice, demonstrând încorporarea antibioticelor în structura apatitei. Rezultatele arată că prin combinarea hidroxiapatitei dopate cu argint cu unele dintre cele mai populare antibiotice, utilizate în tratamentul unui număr mare de infecții bacteriene la nivel mondial, ar putea fi produs un material compozit puternic, capabil de a eradică diferite tulpini

bacteriene. De asemenea, activitatea antimicrobiană a ambelor antibiotice a fost stimulată de prezența ionilor de argint din compoziția straturilor studiate. Studiul a demonstrat potentialul unui nou material care ar putea fi folosit în viitor pentru diferite aplicații biomedicale.

Faza *Multistructuri transparente formate din semiconductori degenerati si materiale cu potential feroelectric* a constat in investigarea heterostructurilor transparente obtinute prin depunere cu ajutorul laserului pulsant formate din electrozi transparenti (semiconductori cu banda larga degenerati – Al:ZnO) si un strat dielectric/feroelectric (Li:ZnO), structuri depuse pe substraturi monocristaline transparente (ZnO, SrTiO₃). Multistructurile au fost investigate structural (XRD), optic (SEM) si electric (caracteristici curent-tensiune (IV), masuratori de histerezis si capacitate). Rezultatele obtinute reprezinta o excelenta baza de cunoastere pentru realizarea ulterioara a unor dispozitive transparente de tip tranzistor cu efect de camp si cu proprietati feroelectrice.

In cadrul fazei *Efecte de interfata in structuri complexe feroelectric-feromagnetice* s-au realizat heterostructuri epitaxiale din materiale feroelectrice Pb(Zr,Ti)O₃ (PZT) sau BaTiO₃ (BTO) si materiale feromagnetice CoFe₂O₄ (CFO) sau La_xSr_{1-x}MnO₃ (LSMO) pe electrozi diferiti, utilizand ca metoda de depunere ablatia in fascicul laser pulsant. S-au studiat interfetele intre aceste materiale cu proprietati diferite atat structurale cat si electrice/dielectrice sau magnetice, interfete care genereaza schimbari ale caracteristicilor structurilor multi-strat fata de cele ale materialelor constituinte prin interactii mecanice (tensiuni in retelele cristaline ale filmelor), interactii electrostatice sau prin interactii de schimb magnetice. Astfel, s-a efectuat analiza structurala a heterostructurilor prin tehnici specifice cum ar fi difractia de raze X si microscopia electronica de transmisie, investigarea proprietatilor magnetice si electrice prin utilizarea unor metode specifice de masura (magnetometrie VSM si SQUID, masuratori de capacitate si impedanta, etc). Microscopia TEM a aratat ca in cazul structurii PZT/CFO/PZT/LSMO/STO straturile subtiri au o densitate de defecte mai mare, iar interfetele si suprafata probei sunt mult mai rugoase. Din masuratorile de magnetizare s-au determinat valorile campurilor coercitive si diferite tendinte de saturare in functie de geometria de masura perpendiculara sau paralela, datorita existentei unor mecanisme de rotatie a spinilor precum si a anizotropiilor out-of plane diferite. S-au determinat curbele de histerezis a polarizarii in functie de tensiunea aplicata, curbele rectangulare obtinute demonstrand proprietatea de feroelectricitate.

O aplicatie foarte importanta a materialelor oxidice este in senzorii de gaze, asa cum rezulta din faza: *Obtinerea SnO₂-CuO-WO₃. Caracterizarea structurala si morfologica a sistemului ternar. Investigatii preliminare ale proprietatilor gaz-senzitive in conditii habituale*. Cercetarile din cadrul fazei si-au propus gasirea unei solutii de monitorizare a noxelor habituale utilizand sistemul ternar SnO₂-CuO-WO₃. Alegerea celor trei oxizi se bazeaza pe proprietatile specifice gaz-senzitive ale fiecaruia in parte, iar combinarea lor are drept scop depasirea limitarilor curente. S-a realizat cu succes sinteza SnO₂-CuO-WO₃ printr-o metoda noua de autoasamblare (coprecipitare) fara tratament hidrotermal, cu surfactanti neionici ca agenti de directionare a structurii. Pulberile de SnO₂-CuO-WO₃ obtinute s-au caracterizat prin XRD si SEM, iar senzorii de gaze fabricate din aceste pulberi au fost studiate din punct de vedere al proprietatilor de detectie selectiva a noxelor de H₂S in conditii habituale, rezultatele testelor fiind promitatoare.

In cadrul fazei *Sinteza si caracterizarea hidroxizilor multifunctionali de tip M(OH)₂ (M = Ca, Mg) dopati cu ioni ai metalelor de tranzitie* s-a urmarit obtinerea sub forma de pulberi cristaline a hidroxizilor de Ca si de Mg nedopati si dopati cu ioni ai metalelor de tranzitie, folosind o metoda simpla si ieftina – coprecipitarea. Caracterizarea morfo-structurala a pulberilor astfel obtinute s-a realizat folosind tehnici experimentale ca difractia de raze X pe pulberi, spectroscopia FTIR si microscopia electronica TEM. Gradul de incorporare a ionilor dopanti in reseaua cristalina a Mg(OH)₂ si a Ca(OH)₂ a fost investigata folosind tehnica spectroscopica RES, iar influenta ionilor dopanti asupra proprietatilor optice ale hidroxizilor metalici investigati a fost evidentiata prin spectroscopia UV-Vis.

Tema B se refera la ***Sinteza si caracterizarea de materiale magnetice si supraconductoare cu potential de aplicatii.***

In cadrul acestei teme, faza *Sinteza si caracterizarea heterostructurilor de tip izolator/supraconductor nanostructurat* a avut ca obiective fabricarea si caracterizarea exhaustiva a unor heterostructuri supraconductor/izolator compuse din supraconductori nanostructurati (YBa₂Cu₃O₇ dopat cu BaZrO₃) si SrTiO₃. Astfel, s-au realizat urmatoarele: cresterea prin ablatie laser (Pulsed Laser Deposition, PLD) a heterostructurilor compuse din straturi supraconductoare groase (1.5 μm) cu centri pinning nanostructurati, obtinute prin ablatia unei tinte de YBa₂Cu₃O_x (YBCO) dopata (4-5% at.) cu BaZrO₃ (BZO), separate prin straturi subtiri (zeci de nm) izolatoare din SrTiO₃ (STO); investigarea dependentei de campul magnetic aplicat a densitatii de curent critic rezultata din histerezisul curbelor de magnetizare izoterme in aceste heterostructuri; investigarea dependentei de orientarea campului magnetic aplicat a densitatii critice de curent prin masuratori de transport electric folosind rotatorul in camp al echipamentului PPMS; investigarea potentialului de fixare a cuantelor de camp magnetic (vortexuri) de catre centri

pinning creati de catre nanofirele si nanoinsulele de BZO din matricea YBCO, si de cele create suplimentar la interfetele YBCO(BZO)/STO; precum si caracterizarea structurala si morfologica prin microscopie de electroni si corelarea defectelor observate cu proprietatile supraconductoare. S-a evidentiat faptul ca stratul izolator the STO, cu grosime de zeci de nm, nu impiedeaza asupra calitatii stratului supraconductor crescut ulterior. In plus, masuratori de magnetizare, susceptibilitate multiarmonica si transport electric in campuri magnetice cu diverse orientari au evidentiat o crestere a densitatii critice de curent, o valoare mare a potentialului mediu de fixare a vortexurilor si o anizotropie scazuta a curentului critic intr-o plaja larga a campului magnetic. Aceste imbunatatiri se datoreaza centrilor sinergetici de fixare, obtinuti prin decorarea substratului cu nano-insule de argint, prin auto-asamplarea nanofirelor de BZO in matricea de YBCO, si la interfetele supraconductor izolator. La anumite valori ale campului magnetic s-a observat o despicare a peak-ului in dependenta densitatii critice de curent de unghiul dintre campul magnetic si heterostructura, care a fost explicat prin segmentarea in forma de scara a vortexurilor inclinate aproape paralel cu planul stratului, pentru a-si minimiza energia fixandu-se pe segmentele de defecte din planele a-b induse la interfete. Concluziile sunt sustinute calitativ si de imagini de microscopie electronica in transmisie.

Faza *Magnetism si polarizare de spin in noi compusi Heusler* si-a propus analiza teoretica a unor compusi full-Heusler noi, pe baza de zirconiu, care prezinta atat proprietati de semimetale atipice cat si un moment magnetic total nul in starea fundamentala. Analiza a fost facuta pe baza teoriei functionalei de densitate (Density Functional Theory - DFT). Aceste aliaje au fost numite ferimagneti semimetalici atipici complet compensati (Spin Gapless Completely Compensated Ferrimagnets - SG-CCF). Compusii pe baza de zirconiu au fost selectati deoarece prezinta toxicitate redusa, ceea ce permite prepararea experimentală si procesarea lor convenabila. Astfel, au fost analizate structura electronica si proprietatile magnetice ale compusilor Heusler noi Zr_2MnZ ($Z=Al, Ga, In$), pentru a evidentia potentialele proprietati semimetalice atipice si momentul magnetic total complet compensat, cu scopul de a dezvolta noi compusi pentru electrozi cu polarizare stabila pentru jonctiuni cu tunelare (TMR) sau oscilatoare nano STTNO (Spin-Transfer Torque Nano Oscilator) pentru telecomunicatii. S-a demonstrat ca aliajul full-Heusler Zr_2MnAl cumuleaza doua proprietati interesante (ferimagnetismul semimetalic atipic si momentul magnetic total compensat). Prin calculul densitatilor de stari, s-a obtinut la nivelul Fermi compusul prezinta o banda interzisa determinata de purtatorii de spin majoritari (spin-up) si o banda interzisa inchisa formata de purtatorii de spin minoritari (spin-down). Momentul magnetic rezultat al atomilor de mangan este compensat de suma dintre momentul asociat atomilor de zirconiu si respectiv momentul asociat regiunii interstitiale, respectand curba Slater Pauling. In concluzie acest material nu genereaza campuri magnetice la distanta si de aceea poate conduce la simplificarea si micșorarea valvelor de spin actuale.

In cadrul fazei *Magnetism si interactii in sisteme de nanoentitati magnetice pentru aplicatii bio-medicale* s-au urmarit studii complexe pe ferrofluide magnetice (FF), cu diverse fractii volumice, cu aplicatii directe in hipertermia magnetica. In acest tip de aplicatii, particulele magnetice functionalizate sunt fixate, prin proceduri specifice, pe tesuturi tumorale tinta, iar in urma aplicarii externe a unor campuri magnetice alternative, prin procese de relaxare magnetica, are loc o disipare de caldura care determina o crestere de temperatura (cu doar cateva grade Celsius peste temperatura fiziologica), cu scopul de-a distruge celulele tumorale. S-a urmarit evaluarea unitara a tuturor parametrilor morfo-structurali si magnetici ce pot influenta rata specifica de absorbtie (SAR), precum si determinarea dependentei acestora de fractia volumica. Sistemele de ferrofluide magnetice supuse investigatiei, avand la baza ansambluri de nanoparticule superparamagnetice (SPM) de magnetita (monodomeniu magnetic) au fost preparate prin coprecipitare, functionalizate si dispersate in ulei de transformator conform unei proceduri originale. Proprietatile magnetice ale sistemelor de nanoparticule au fost studiate si analizate prin intermediul magnetometriei de inalta sensibilitate de tip SQUID, prin spectroscopie Mossbauer sau masuratori de calorimetrie. Cu scopul de-a analiza influenta fractiei volumice asupra raspunsului SPM al unui ferofluid, au fost investigate diverse FF cu fractii volumice cuprinse in intervalul (0.005-0.16). S-a evaluat cantitativ, in raport cu fractia volumica, influenta pe care interactiunile magnetice dipolare ce se manifesta in ferofluide o au asupra timpilor caracteristici de relaxare. S-au inregistrat curbe de temperatura, care ulterior au fost corectate prin aplicarea unor metodologii originale, obtinandu-se profilele adiabactice de incalzire. Din experimente si analiza datelor s-a constatat ca interactiile magnetice dipolare influenteaza drastic SAR-ul; s-a observat o reducere a SAR (de pana la 70 de procente) fata de cazul lipsei interactiei dipolare odata cu cresterea fractiei volumice si a amplitudinii campului de excitatie, cu implicatii asupra aplicabilitatii acestor ferrofluide.

Faza *Aliaje nanocompozite magnetice cu faza $L1_0$ cuplate prin schimb* a avut drept scop elaborarea si caracterizarea unor aliaje nanocompozite magnetice pe baza de precursori binari FePt si CoPt, aliaje ce contin faze de interes magnetic $L1_0$, cuplate prin intermediul interactiunii de schimb. S-au efectuat sinteze in conditii de neechilibru de materiale

magnetice de tip aliaje nanocompozite cu structuri magnetice de dimensiuni nanometrice. Deoarece diagramele de faze nu permit obtinerea prin metode clasice de compozitii de faza tipice magnetilor nanocompoziti, pentru sinteza s-a optat pentru solidificarea ultrarapida din topitura, care permite obtinerea in stare solida, as-cast, a unor faze structurale sau compuneri de faze structurale, in aliajele ternare, care nu sunt posibile decat in starea lichida. Acest lucru este facut posibil de gradientul de racire extrem de rapid (10^{-6} K/s) de solidificare in cazul metodei utilizate in acest caz. Compozitia de faze a fost apoi caracterizata structural prin intermediul difractiei de radiatie X si respectiv magnetic prin intermediul magnetometriei in proba vibranta sau a magnetometriei cu bobina supraconductoare SQUID. Rezultatele obtinute au demonstrat, in doua sisteme de magneti permanenti fara pamanturi rare, posibilitatea co-existentei de faze magnetice dure si moi, faze care sunt complet cuplate prin schimb, astfel incat se deschid perspectivele optimizarii materialului prin rafinarea ulterioara a microstructurii obtinute, realizarea unui cuplaj magnetic la scara nanometrica si optimizarea raspunsului magnetic respectiv obtinerea unui produs energetic maxim (BH)_{max} la o valoare compatibila cu sistemul FePt, fapt ce ar permite considerarea acestor sisteme ca precursori pentru viitoarea clasa de magneti permanenti fara pamanturi rare, cu aplicatii in cele mai diverse tehnologii emergente.

In cadrul fazei *Structura si magnetism in ferite nanocristaline* s-a efectuat un studiu aprofundat al unei categorii de sisteme tip nanoparticule intens studiate din perspectiva abordarii legaturilor dintre proprietatile magnetice, chimice si de structura, si anume feritele nanocristaline. Feritele de Ni au fost preparate prin metoda precursorilor citrat, iar ceramicile vitroase bazate pe magnetita au fost obtinute prin cristalizarea topiturilor borosilicate care contin Fe, in prezenta agentului de nucleatie P_2O_5 . Dupa prepararea probelor prin una din cele 2 metode, s-a efectuat o caracterizare complexa prin difractie de raze X, microscopie electronica de transmisie si de baleiaj, magnetometrie cu proba vibranta si spectroscopie Mössbauer. In feritele nanocristaline, pentru probele $NiFe_{1.5}Al_{0.5}O_4$ si $NiFe_{1.6}Mn_{0.4}O_4$, s-a evidentiat o structura necoliniara de spini, cu unghiuri de inclinare la pozitiile octaedrice de 22° si, respectiv 28° . In cazul ceramicile vitroase bazate pe magnetita s-a constatat ca, in lipsa agentului de nucleatie mentionat, proba de referinta nu mai contine nanoparticule, ci doar cristalite de dimensiuni mai mari.

In cadrul Temei C, activitatile de cercetare-dezvoltare-inovare au avut in vedere ***Sinteza si caracterizarea de structuri cu dimensionalitate redusa 2D, 1D si 0D.***

Faza *Corelarea parametrilor de crestere cu morfologia si proprietatile optice la cristale 2D-TMD* si-a propus abordarea unui sistem bi-dimensional (2D), si anume di-calcogenizi ai metalelor de tranzitie (TMD- transition metal dicalcogenides) cu formula chimica MX_2 (M poate fi Mo, W, etc si X=S, Se, etc). Un prim avantaj al materialelor 2D pe baza de calcogenizi este acela ca ele pot fi crescute pe diversi suportii inclusiv oxizi sau semiconductori, in timp ce pentru materialele 2D din grupa a IV este nevoie de substrat metalic pentru a creste straturi de grafena, silicena sau germanena. Fata de materialele 2D din grupa IV care sunt semimetale cu banda interzisa nula, materialele 2D calcogenide sunt semiconductori cu banda interzisa directa, ceea ce conduce la cresterea cu ordine de marime a eficientei recombinarii radiative cu importanta in optoelectronica si senzori bazati pe efecte optice; au energia de legatura a excitonilor foarte mare si sensibila la efectele dielectrice de confinare, permitand aplicatii ca senzori; iar interactia de cuplaj spin-orbita cu despicari largi intr-o banda de valenta si efecte de polarizare de spin este importanta pentru aplicatii in spintronica. Au fost crescute prin PVD straturi atomice pe baza de MoS_2 obtinandu-se straturi 2D- MoS_2 ale caror calitati superioare au fost demonstrate prin masuratori de polarizare de spin. S-a urmarit in principal obtinerea de 2D- MoS_2 pe suportii de SiO_2/Si , prin cresteri nucleate de catre ferestre corodate chimic in stratul de SiO_2 si de fulgi de grafena plasati pe suprafata de SiO_2 . S-a urmarit si realizarea de jonctiuni laterale si verticale de 2D- MoS_2 /grafena, ambele deziderate fiind de importanta majora in aplicatii de electronica si optoelectronica. A fost demonstrat faptul ca, folosind metoda de depuneri PVD de straturi de grosimi atomice de MoS_2 s-au obtinut cresteri pe suportii de SiO_2/Si cu nucleere preferentiala la marginea ferestrelor in SiO_2 si la fulgi de grafena. Rezultatele au o importanta deosebita atat din punct de vedere al cercetarilor fundamentale, cat si pentru aplicatii practice. In principal s-a urmarit dependenta cresterii de 2D- MoS_2 functie de temperatura si timpul de depunere. Acoperiri 2D- MoS_2 de largime de peste $50 \mu m$ au fost obtinute prin nucleere la marginea ferestrelor in SiO_2 . Straturile au fost investigate prin masurari Raman, fotoluminescenta, microscopie optica si SEM pentru determinari de structura si calitate cristalina. S-a demonstrat de asemenea formarea de heterojonctiuni 2D- MoS_2 cu grafena si cresterea de nanofire (nanotuburi) pe suprafata grafenei.

In cadrul fazei *Heterostructuri organice obtinute prin evaporare termica in vid pe substrat flexibil* s-au realizat heterostructuri cu unul sau mai multe straturi pe baza de compusi organici mic moleculari (CuPc, PTCD, Alq3) pe substrat flexibil de IZO (In:ZnO) si au fost investigate proprietatile structurale, optice si electrice ale acestora. De asemenea s-a efectuat un studiu comparativ cu alte structuri obtinute pe substrat de ITO (oxid de indiu si staniu). Cercetarile au aratat ca prin PLD se pot obtine straturi IZO de calitate ridicata chiar si pe substrat flexibil (cu aplicatii in

electronica transparenta si flexibila), caracterizate de o transparenta ridicata si o rezistivitate scazuta. De asemenea, s-a descoperit ca heterostructurile organice realizate pe suport de IZO prezinta un curent mult mai bun daca IZO a fost tratat anterior in plasma. Adaugarea unui strat suplimentar de Alq3 la structura cu doua straturi organice CuPc/PTCDA realizata pe IZO-netratat termic (IZO-UN) duce de asemenea la o crestere a curentului. IZO poate inlocui cu succes ITO atat in dispozitive organice fotovoltaice (OPV) cat si in OLED-uri (diode organice emitatoare de lumina) intrucat au proprietati asemenatoare iar heterostructurile realizate cu doua straturi organice atat pe ITO cat si pe IZO prezinta valori apropiate ale curentului. In plus, rezultatele fazei au demonstrat ca pe structura cu IZO-UN a fost pusa in evidenta aparitia efectului fotovoltaic.

Faza *Studiul morfologiei si a proprietatilor optice ale straturilor subtiri pe baza de Si-Ge-Sn nanostructurat in matrice dielectrica* a avut ca subiect fabricarea si studiul straturilor subtiri formate din nanocristale (NC) din sistemul Si-Ge-Sn. A fost important atat studiul filmelor nanostructurate de GeSi cat si al filmelor al celor continand NC de GeSi imersate in matrice dielectrice. Cercetarile au fost focalizate catre obtinerea de filme cu NC cu compozitii diferite in sistemele GeSi si GeSn. A fost studiata morfologia (microscopie electronica, spectroscopie Raman, XPS), cat si proprietatile optice (absorbție, luminescenta, fotoconductie) ale unor straturi dielectrice cu NC din sistemele GeSi / GeSn, avand in vedere potentialul lor aplicativ dat de extinderea pragului de sensibilitate in domeniul IR. Rezultatele au aratat ca filmele de GeSi nanostructurat, depuse prin pulverizare catodica magnetron (MS-magnetron sputtering) pe substrat de Si cu un raport Ge:Si de aproximativ 55:45 si tratate termic in cuptor la temperaturi cuprinse intre 700 si 900 °C prezinta morfologii, si corelat, proprietati electrice diferite in functie de temperatura de tratament. Astfel, la 700 °C segregarea Ge produce domenii mici, cu concentratie de Ge mare, si cea mai mare parte a filmului cristalizeaza ca GeSi cu continut de Ge mai mic decat compozitia medie a filmului. Odata cu cresterea temperaturii de tratament de la 700 la 800 °C, procesul de cristalizare este mai rapid, Ge segrega mai putin si in consecinta compozitia NC de GeSi este mai apropiata de compozitia medie a filmului. In structurile cu NP de GeSi inglobate in SiO₂, depuse tot prin MS pe substrat de Si si tratate termic, s-a pus in evidenta prin masurari SEM si TEM structurarea filmului cu NC de GeSi in SiO₂ in doua straturi: unul adiacent stratului buffer de SiO₂, care contine NC de GeSi a caror dimensiune si densitate variaza cu adancimea, si un strat relativ neted spre suprafata libera. Marirea temperaturii de tratament de la 700 la 1000 °C conduce la mai buna cristalizare a GeSi ceea ce are drept consecinta cresterea valorii curentului de intuneric, ca si a raportului $I_{\text{foto}}/I_{\text{intuneric}}$. Distributia spectrala a fotocurentului arata ca probele tratate la 1000 °C prezinta un interval larg de sensibilitate spectrala si un maxim principal positionat la 840 nm, si care se datoreaza probabil contributiei NC de GeSi. Un ultim rezultat a aratat ca filmele de GeSn cu diverse concentratii de Sn, depuse prin MS pe substrat de cuarț, si caracterizate din punctul de vedere al transmisiei si reflexiei, arata ca indicele de refractie creste cu cresterea continutului de Sn si ca are valori mai mari decat indicele de reflectie al straturilor de Ge amorf. De asemenea, cu cresterea continutului de Sn se observa o crestere a coeficientului de absorbție.

In cadrul fazei *Proprietati si transformari morfostructurale in materiale de interes pentru domeniul nuclear* sunt abordate alt tip de obiecte uni-dimensionale (1D) si anume trasele produse prin iradiere. Au fost aplicate tehnici avansate de microscopie electronica de inalta rezolutie pentru caracterizarea defectelor induse prin iradierea cu particule de energii inalte in materiale de interes pentru aplicatii in domeniul nuclear si aerospacial. Aceste studii au fost derulate in cadrul unor proiecte selectate pe baza de competitie in cadrul consorțiului CERIC. In principal, s-a urmarit determinarea dimensiunilor traselor de ioni induse prin iradierea cu particule de energii inalte in CaF₂, precum si terminarea prin STEM-EELS a modificarilor compozitiei chimice a cristalului de CaF₂ ca urmare a iradierii. Observatiile de microscopie electronica au demonstrat ca formarea traselor de ioni in CaF₂ pentru valori ale puterii de stopare electronice mai mici de 3 keV/nm are loc doar in prezenta topirii. Trasele de ioni observate prin TEM dupa iradiere la aceeasi putere de stopare mica indica faptul ca interpretarea curenta a formarii traselor de ioni printr-un mecanism de spike termic este inadecvata si ca este necesara studierea unui alt posibil mecanism. Datele obtinute prin TEM demonstreaza in mod convingator ca evaluarea dimensiunii traselor de ioni se poate realiza folosind aceasta tehnica in conditii speciale ale imaginii. Determinarile STEM-EELS au dovedit ca fluorul ramane in interiorul materialului cand se formeaza trasele de ioni in CaF₂.

Faza *Sinteza si proprietatile optice ale oxidului de grafena redus functionalizat cu poli para fenilen vinilen si-a* propus evidentierea proprietatilor optice ale compozitelor bazate pe oxid de grafena (RGO) in stare redusa functionalizat cu poli para fenilen vinilen (PPV), sintetizat pe cale chimica si electrochimica. A fost pusa in practica o noua metoda pentru functionalizarea RGO cu PPV folosind voltametria ciclica, au fost realizate studii de spectroscopie Raman si FTIR in vederea elucidarii structurii moleculare a compozitelor PPV/RGO, s-a studiat prin fotoluminescenta (PL) influenta RGO asupra lungimii lanturilor macromoleculare ale PPV sintetizat prin metoda conversiei termice a solutiei de precursor de PPV precum si prin metoda electropolimerizarii tetra bromo p- xilenului (TBPX) si au fost

efectuate studii de spectroscopie IR in geometria de reflexie incidenta la unghi razant. Folosind metoda SERS, spectroscopia FTIR in geometrie de reflexie in unghi razant si studiile de fotoluminescenta, s-a demonstrat ca obtinerea de compozite de tip PPV nedopat/RGO rezulta din conversia termica a solutiei precursorului de PPV cu diferite concentratii de RGO. Masuratorile de fotoluminescenta polarizata au indicat ca unghiul de legare (θ_{PL}), variaza de la 12° la 31°, cand concentratia de RGO creste de la 0 la 0.5 %, un rol important avand interactiile π - π^* intre ciclurile benzenice ale PPV in stare nedopata si foile de RGO. Tot din spectroscopia FTIR a rezultat prezenta a doi produsi de reactie, PPV dopat si DSB, obtinuti prin polimerizarea electrochimica a TBPX pe suprafata electrodului de aur, cand voltametria ciclica a fost oprita la potentialul de + 2V fata de electrodul de referinta Ag/AgCl. Utilizand studii corelate de spectroscopie IR si de PL au fost puse in evidenta diverse schimbari in solutia polimerizarii electrochimice pe masura cresterii concentratiei de RGO. Rezultatele pot anticipa aplicatii in domeniul stocarii energiei si in optoelectronica.

Tema D are drept scop **Sinteza si caracterizarea de compusi de tip halizi si calcogenizi cu potential de aplicatii.**

In cadrul acestei teme, faza *Sinteza, caracterizare morfologica si proprietati luminescente ale heterostructurilor de BaFBr-Er³⁺@SiO₂* si-a propus prepararea nanostructurilor luminescente (tip placheta) BaFBr dopate cu Er³⁺ urmate de acoperirea cu SiO₂ si caracterizarea acestora folosind masuratori structurale (difractie de radiatii X) si morfologice (microscopie electronica SEM). De mare interes este si urmarirea influentei concentratiei dopantului si a acoperirii cu SiO₂ asupra proprietatilor de luminescenta (de tip "up-conversie", mai exact conversia radiatiei infrarosii in domeniul vizibil). S-au sintetizat pentru prima data nanoparticule de BaFBr:Er³⁺ prin metoda precipitarii si heterostructuri "core-shell" BaFBr:Er³⁺/SiO₂. S-a dovedit utilitatea acoperirii acestor nanoparticule cu SiO₂ pentru evitarea aglomerarii si mentinerea/imbunatatirea stabilitatii chimice si a proprietatilor luminescente. S-a observat ca la pompaj cu radiatie laser 800nm atat nanoparticulele de BaFBr:Er³⁺ cat si heterostructurile "core-shell" BaFBr:Er³⁺/SiO₂ prezinta fenomenul de luminescenta de tip UC ("up-conversion") asociat ionului Er³⁺ in care sunt implicati doi fotoni; eficienta relativa in ultimul caz fiind de aprox. 2%. Rezultatele obtinute sunt importante in aplicatii precum markerii fluorescenti pentru bioimagistica si biodetectie atât in-vitro cat si in- vivo sau ca agenti antimicrobieni.

In cadrul fazei *Studiul difuziei cuprului in stratul subtiri calcogenice sub influenta luminii* s-au depus doua probe de bistrat Cu-As₂S₃ pe suporti de sticla, in structura sticla-Cu-As₂S₃ prin metoda pulverizarii magnetron (MS) pentru Cu si, respectiv, ablatie laser (PLD) pentru As₂S₃. Grosimea stratului de Cu a fost de ~ 30 nm, iar cea a stratului de As₂S₃ de ~ 800 nm. Pentru comparatie, folosind aceleasi metode a fost crescut si un strat mai gros, As₂S₃ de ~ 2000 nm. S-a observat ca in urma depunerii structurile de stratul subtiri s-au exfoliat partial, iar in timpul studiului efectului luminii asupra difuziei Cu in stratul de As₂S₃ aceasta exfoliere s-a si accentuat. Determinarile XRD s-au efectuat pe probele initiale, pe toata suprafata lor, in timp ce studiul morfologiei suprafetei probelor, studiul influentei diferitelor tipuri de iluminari prin XPS si spectroscopie optica asupra fotodifuziei cuprului s-a realizat cu ajutorul unor masti confectionate dedicat pentru aceste probe, si care au fost aplicate in zonele ne-exfoliate ale probelor. Aceste masti au asigurat orientarea pe suprafata probelor pentru iluminarile succesive. Mastile au avut fiecare trei orificii cu diametru de 3 mm, prin care zonele circulare libere au putut fi expuse in mod iterativ la iluminari diferite: lumina de banda larga (BB), lumina monocromatica verde de 532 nm (GL), si lumina monocromatica violet de 405 nm (VL). Spectrele XRD arata ca pe ambele probe stratul de As₂S₃ are o structura amorfa, nefiind observate maxime cristaline. Caracterizarile morfologice prin microscopie electronica de baleiaj (SEM + EDX) au aratat ca structurile bistrat realizate prezentau inca de la depunerea stratului de As₂S₃ peste stratul de Cu o exfoliere semnificativa. Iluminarile succesive menite sa induca sau sa accelereze difuzia cuprului in straturile subtiri de As₂S₃ au condus, ca o prima observatie, la accentuarea acestei exfolieri initiale. Determinarilor EDX arata ca, in urma depunerii, stoichiometria compusului de As₂S₃ pare sa fi suferit o deplasare catre compozitia As₄S₄. Din EDX se remarca insa prezenta cuprului in pondere de aproximativ 17-19 % in toate zonele masurate. Valoarea initiala de cca 17% fara iluminare pare sa se modifice doar foarte putin (practic in marja de eroare a metodei) sub actiunea diferitelor iluminari, ceea ce favorizeaza ipoteza ca difuzia stratului de Cu s-a stabilizat imediat in prima perioada dupa producerea structurii bistrat, sub actiunea temperaturii de depunere. Difuzia fotoindusa a unui strat subtire metalic intr-un strat subtire calcogenic amorf poate fi pusa in evidenta si prin valorile crescande ale transmisiei optice, pe masura ce stratul metalic se "dizolva" in stratul subtire amorf. Cunoscand ca stratul subtire amorf de As₂S₃ are muchia de absorbtie in jurul valorii de 500 nm, si prezinta o foarte ridicata transmisie in domeniul NIR, spectrele de transmisie au fost inregistrate in doua domenii de lungimi de unda: primul domeniu pana la 800 nm, iar al doilea domeniu de la 800 la 1200 nm. Experimentul a aratat ca modificarile valorilor transmisiei optice sunt modeste, indiferent de natura sursei de iluminare si nu totdeauna proportionale cu cantitatea de iluminare. Studiile XPS arata ca liniile corespunzatoare energiilor de legatura ai electronilor legaturii As-O se muta la valori mai mici in energii de legatura a electronilor sub influenta radiatiilor laser GL si VL. Aceasta modificare poate fi atribuita unui proces de reducere a As₂O₃ de la suprafata stratului de As₂S₃, ori unui proces de dezvoltare a unor legaturi As-S in

detrimentul celor de As-O. Studiul preliminar de spectroscopie dielectrica arata o modificare radicala a comportamentului structurii Cu-As₂S₃-Cu la aplicarea unei tensiuni de polarizare, aspect care va fi examinat mai in detaliu in viitor pe probe mai robuste, tinand cont ca in ultima saptamana din proiect s-a reusit fabricarea unei bistrat Cu-As₂S₃ pe suporti de sticla fara exfoliere dupa crestere.

Proiect 3: Materiale functionale si structuri cu impact tehnologic; noi dispozitive si metode de sinteza si de analiza.

Principalele tinte ale acestui proiect sunt:

c) Dezvoltarea de noi tehnici de investigare si caracterizare.

a) Dezvoltarea de echipamente si prototipuri pentru sinteza si analiza de materiale si structuri.

Pentru dezvoltarea de echipamente, am avut ca prim obiectiv realizarea unei instalatii pilot de tratamente termice rapide pentru filme ceramice dielectrice si feroelectrice. Incalzirea se realizeaza cu fascicule de radiatie termica (IR) obtinute de la lampi cu halogen de putere mare. Dispozitivul poate fi utilizat pentru prepararea de straturi subtiri prin metode avand cost redus de implementare.

Instalatia de tratament termic rapid pentru straturi subtiri ITTRSS-01 utilizeaza radiatia IR, emisa de lampii cu halogen, pentru a incalzi straturile subtiri din materiale oxidice, in vederea cristalizarii. Straturile subtiri din materiale oxidice (ex. materiale cu structura perovskit) se pot depune pe suport prin sol-gel (centrifugarea unei solutii pe suport, urmata de gelare si piroliza pentru eliminarea componentelor organice). Straturile astfel depuse au o structura amorfa, deci trebuie cristalizate pentru a obtine proprietatile dorite. Tratamentul termic se poate face conventional, cu viteza mica de crestere a temperaturii folosind cuptoare incalzite rezistiv, sau rapid, folosind instalatii precum ITTRSS-01.

Pe baza documentarii privind modul de realizare a produselor similare, s-a proiectat modelul experimental, realizandu-se documentatia tehnica (ansamblu general, ansamble, repere, schema optica, schema electronica, montajul, manualul de utilizare). Pentru obtinerii temperaturii impuse de maxim 1200°C s-a adoptat solutia incalzirii cu radiatie IR, cu lampi xenon. Folosirea lampilor xenon cu distanta focala fixa (19mm) asigura: - rampa abrupta de crestere a temperaturii,

- temperatura in focar de 1300°C
- uniformitatea zonei de incalzire 1"x1" prin defocalizarea controlata a radiatiei emise.

Controlul temperaturii este asigurat cu controller de temperatura, regulator PID, sursa de alimentare, modulator PWM, thermistor. Interfata cu utilizatorul asigura: modificarea conditiilor de functionare, stabilirea valorilor constantelor ce intervin in legea de reglare, functionarea automata/ manuala, afisarea temperaturii setate, afisarea temperaturii obtinute, timpul de functionare pe palier.

Activitatile principale au fost legate de proiectarea modelului experimental prin:

- proiectarea optico-mecanica
- proiectarea componentelor electronice
- realizarea unui manual de functionare

Schema de ansamblu a instalatiei este prezentata mai jos:



Astfel a fost realizat și testat modelul experimental al instalației de tratament termic rapid pentru straturi subțiri ITTRSS-01 și putem spune că:

- Subansamblurile mecanice au o manevrabilitate maximă, dimensiuni mici.
- Prin folosirea unor lampi xenon de înaltă performanță, sursele de lumină au un timp de viață mult mai mare, oferă o iluminare uniformă, ceea ce duce la un randament de iluminare (încalzire) îmbunătățit.

Un al doilea obiectiv a fost acela de realizare a unei noi instalații XPS cu posibilitatea de dezvoltare de sisteme similare pentru beneficiari externi.

Activitățile acestui obiectiv au fost:

- a) Proiectarea mecanică a sistemului
- b) Punerii în practică a proiectării

Au fost necesare câteva scheme bloc, realizate în SolidWorks pentru:

- proiectarea piesei intermediare necesare transferului suportului de probe între incinta de analiză și sasul de introducere rapidă
- suportul de probe
- sistemul manipulator de prindere a suportului de probe
- transferului suportului de probe între incinta de analiză XPS și sasul de introducere rapidă
- proiectarea sistemului de fixare și suport a incintelor de vid

Pe lângă aceste activități, o parte din componentele instalației au fost achiziționate. Prețul total de achiziție pentru sistemul proiectat și realizat la cca. 160.000 EUR, mult mai mic comparativ cu cei cca. 300.000 EUR - prețul unei instalații similare la unul dintre distribuitori, după cum ne-am și propus. Nu este necesară crearea unui manual de utilizare a întregii instalații (în limba română sau în limba engleză), având în vedere că producătorii componentelor sensibile (analizor de electroni, pompe de vid) oferă manuale de instrucțiuni în limba engleză, iar personalul implicat în manipularea instalațiilor este înalt calificat, între sarcinile de serviciu numărându-se și cunoașterea limbii engleze la nivel mediu-avansat.



Detalii suplimentare despre realizarea instalației și despre spectroscopia de fotoelectroni ca metodă de studiu sunt oferite în raportul *in extenso* al fazei.

b) Obținerea de rezultate brevetabile în domeniul noilor materiale.

La cea de-a doua direcție de obținere a unor rezultate brevetabile în domeniul noilor materiale, am avut ca un prim obiectiv, obținerea de materiale noi cu aplicații speciale ca ceramici, feroelectrici, materiale magnetice și termoelectrice.

Activitățile specifice au fost:

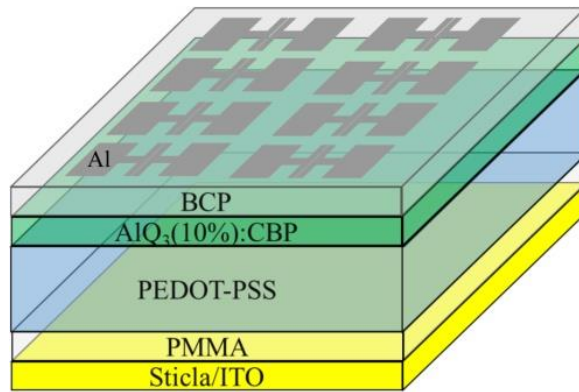
- probe cu rol de barieră termică (TBC) obținute prin depuneri în jet de plasmă la diverși parametrii de temperatură-viteză a jetului de plasmă.
- realizarea de secțiuni înglobate și slefuite pentru analiză SEM-EDS
- realizarea de lamele pentru analiză TEM cu grosime nanometrică
- măsurători de difracție de raze X pe suprafața ceramică a epruvetelor TBC
- analiză Rietveld pentru caracterizarea fazelor cristaline a măsurătorilor XRD
- măsurători de morfologie a suprafeței epruvetelor prin analiză SEM
- măsurători de cartografiere elementală realizate prin EDS pe secțiuni ale epruvetelor
- măsurători de microscopie electronică prin transmisie pe lamelele preparate: TEM, SAED, STEM-EDS

Pentru realizarea acestor activități s-au efectuat depuneri prin tehnica APS de straturi ceramice de zirconie stabilizată cu ytrie (YSZ) cu densitate variabilă de-a lungul laturii lungi a unor epruvete de inox. Grosimea straturilor de YSZ este de 200-350 μm pe epruvete de inox cu lungimea de 12 cm. Pentru îmbunătățirea aderenței ceramicii la substrat, substratul a fost acoperit în prealabil cu un strat de contact de superaliaj de NiCoCrAl prin tehnica HVOF. Depunerea ceramicii de YSZ prin tehnica APS s-a realizat astfel încât distanța de la epruvete la capul de depunere APS să se modifice continuu în raport cu lungimea epruvetelor. În acest fel se modifică viteza și temperatura imprimată de jetul de plasmă către pulberea depusă și astfel se preconizează modificarea gradului de porozitate și implicită a densității efective ceramicii depuse. Distanța optimă indicată de producător este de 8 cm. În faza actuală distanța substrat – cap de plasmă s-a modificat continuu între 6-12 cm de-a lungul laturii lungi a epruvetei pe o lungime utilă de 10 cm din cei 12 ai epruvetei.

Odată obținute epruvete acoperite cu ceramică de zirconie depusă prin APS având gradul de porozitate și densitatea modificate de-a lungul lungimii acestora, s-au extras esanțioane cilindrice din cm în cm pe direcția în care variază gradul de porozitate și densitatea stratului ceramic. Pe probele obținute s-au efectuat tomograme de raze X și tomograme de microscopie prin transmisie de electroni (TEM). Rezoluție spațială de achiziție pentru tomograme X este de 1.14 μm, iar pentru tomogramele TEM este de 2 nm. Din reconstrucția tomogramelor rezultă volumul probelor măsurate în care intensitatea fiecărui voxel 3D este proporțională cu densitatea materialului. Selectând volume reprezentative pentru fiecare zonă (substrat, ceramică) s-a putut calibra intensitatea în densitate (g/cm^3) și compara diferența de densitate dintre două probe măsurate simultan.

În ceea ce privește dezvoltarea de materiale pentru dispozitive optoelectronice, s-a urmărit obținerea de tranzistori organici eficienți prin îmbunătățirea transportului de sarcină și creșterea randamentului cuantic intern și extern a acestor dispozitive optoelectronice, precum și dezvoltarea de noi tehnologii pentru eficientizarea acestor dispozitive prin utilizarea unor compusi organometalici și polimeri obținuți în premieră. Activitățile specifice acestei obiective sunt legate de realizarea de heterostructuri de tip organic light emitting transistors prin:

- depunerea de strat dielectric de tip PMMA pe ITO
- depunerea de straturi transportoare de sarcină
- utilizarea unui strat emitent clasic de AlQ_3
- utilizarea de electrozi sursă-drenă în două configurații ITO-ITO, respectiv Al-Al

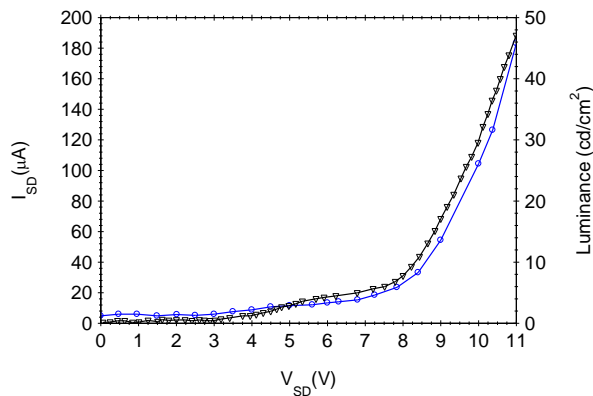


Stratul de ITO (100 nm) are rolul de contact tip poarta. Peste stratul de ITO a fost depus prin centrifugare stratul de dielectric pe baza de PMMA (500 nm) la 3000 rpm timp de 60 s. Stratul dielectric folosit este o solutie de PMMA (Mw = 950.000 g/mol) in anisol de concentratie 7 %. Dupa depunerea stratului de PMMA, substratul a fost sters cu acetona pentru a delimita o suprafata activa de ITO de aproximativ 0.6 cm².

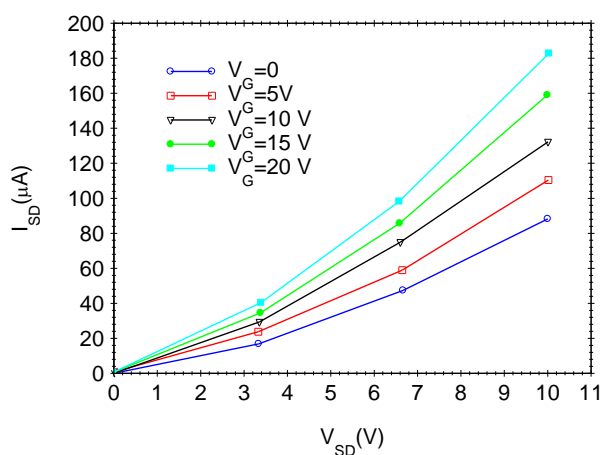
Stratul de PEDOT-PSS (50 nm) a fost depus prin centrifugare la 5000 rpm timp de 30 de secunde urmat de tratament termic pe plita la 120°C si stergerea zonei de ITO cu apa demineralizata. Urmatorul strat, cel pe baza de BCP: AlQ₃, a fost depus tot prin centrifugare la 3000 rpm timp de 30 s, urmat de stergerea zonei de ITO cu alcool izopropilic. Stratul transportor de electroni de tip BCP a fost depus prin evaporare termica la o presiune de 5*10⁻⁶ mbari, urmata de stergerea zonei de ITO cu diclormetan. Contactul de tip sursa-drena pe baza de aluminiu a fost depus folosind tehnica E-beam la o tensiune de 6 kV si un curent de 55 mA, printr-o masca mecanica sursa-drena cu lungimea canalului de 30 μm.

Regiunea activa a structurii de tip OLET este alcatuita din trei straturi organice in contact cu stratul dielectric de PMMA. Primul strat este un polimer transportor de goluri de tip PEDOT-PSS (polimer de tip p), al treilea este un strat polimeric transportor de electroni de tip BCP (polimer de tip n), iar stratul din mijloc este stratul emisiv de tip host-guest care consta dintr-un polimer conductor de tip CBP dopat cu AlQ₃ de concentratie 10 wt% in cloroform.

Masuratorile electrice au fost efectuate pe un analizor parametric modular model Keithley 4200, in configuratie triax. Principal, pentru fiecare proba s-au masurat caracteristicile I-V, sursa drena, iar pentru o valoare optima (care sa nu conduca la distrugerea probei) a curentului sursa-drena, s-a aplicat potentialul de poarta. Caracteristicile curent-tensiune la aplicarea unei tensiuni intre poarta si drena, sunt prezentate mai jos.



Pentru a demonstra caracterul de tranzistor al dispozitivului si pentru a evalua proprietatile de transport ale acestuia, s-au trasat caracteristicile curent-tensiune la diverse tensiuni de poarta aplicate intre electrodul sursa de aluminiu si electrodul de ITO cu rol de poarta in acest dispozitiv.



Se observa o crestere a curentului intre sursa-drena pe masura ce potentialul aplicat intre sursa si poarta creste, ceea ce demonstreaza caracterul de tranzistor al dispozitivului. De mentionat faptul ca avem o polarizare pozitiva pe poarta si negativa pe sursa. Aplicarea unui camp electric pe poarta, modifica campul electric in stratul emisiv, moduland transportul de sarcina in stratul emisiv, in sensul balansarii injectiei de sarcina pozitiva in structura. Este de mentionat faptul ca nu am atins saturatia in aceasta configuratie, deoarece tensiune de poarta aplicata uzual este de 80-100 V, iar stratul de PMMA depus se strapunge la tensiuni peste 25 V.

In cazul biomaterialelor, materiale si dispozitive cu aplicatii in biologie ne-am propus stabilirea in premiera a unui algoritm tehnologic de obtinerea de filme de biosticla/hidroxiapatita la temperaturi reduse prin sinteza fizico-chimica asistata de plasma magnetron. Un astfel de procedeu tehnologic ar putea conduce la reducerea semnificativa a costurilor de fabricatie a acoperirilor implantologice dentare. Acoperirile tip implant au fost preparate direct din precursori pe substraturi metalice de grad medical, prin varierea concentratiei precursorilor chimici sub forma de pulbere (e.g. SiO₂, CaO, MgO, ZnO, Ca₃(PO₄)₂, CaCO₃) care vor compune tinta catod fabricata prin presarea la temperatura camerei si varierea convenabila a conditiilor de depunere (e.g. presiunea totala de lucru, dilutia de oxigen in argon a atmosferei de lucru). S-a studia interdependenta conditii de depunere – modificarile structurale (GIXRD, FTIR si/sau SAED), compozitionale (EDS), electrice si morfologice (AFM, SEM si/sau TEM) – raspuns functional mecanic si biologic (teste *in vitro*).

Principalele activitati au fost:

- Prepararea tintelor catod. Procesul tehnologic de depunere. Metode de caracterizare si testare
- Interpretarea rezultatelor

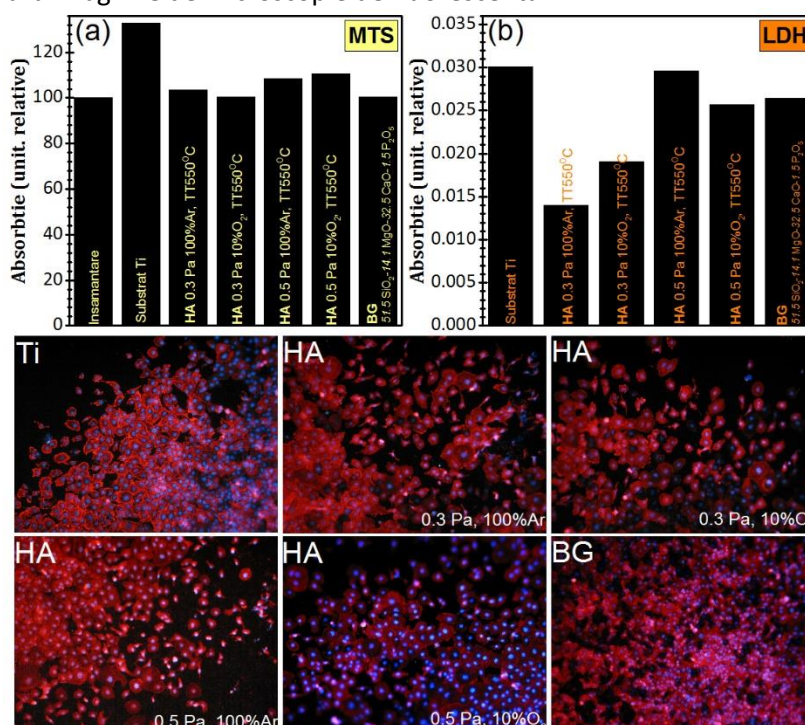
Tintele catod in cazul experimentelor HA au constat din amestecuri de pulberi de CaCO₃ si β-Ca₃(PO₄)₂, obtinute prin mojarare, si presate apoi la temperatura camerei in port-tinte de cupru (nu au fost aplicate procese de calcinare sau sinterizare ulterioare). In cazul experimentelor BG, tinta catod a fost constituita dintr-un disc de cuarț cu diametrul de 110 mm, pe care au fost aplicate in zona de eroziune maxima a „race-track”-ului (Φ55 mm) - datorata proceselor preferentiale de pulverizare induse de confinarea tipica a plasmei magnetron sub forma toroidala - discuri cu diametrul de 12 mm de CaO, MgO si Ca₃(PO₄)₂. Prin numarul si natura acestor discuri s-a reusit controlarea compozitiei filmului sintetizat prin co-pulverizare.

Filmele HA au fost sintetizate utilizand urmatoorii parametri de lucru: presiune totala=0.3 Pa so 0.5 Pa, atmosfera de lucru=100%Ar sau 90%Ar+10%O₂, distanta tinta-substrat=35 mm, timp de depunere: 150 de minute. Pentru refacerea si cristalizarea structurii filmelor HA, amorse din depunere, au fost realizate tratamente termice post-depunere in aer la 550°C/1h si 750°C/1h. Filmele BG au fost sintetizate utilizand urmatoorii parametri de lucru: presiune totala=0.3 Pa, atmosfera de lucru=100%Ar, distanta tinta-substrat=35 mm, timp de depunere: 150 de minute. Conditii de depunere alese au fost inspirate din experienta echipei de cercetare in fabricarea clasica (tinte din materiale sursa HA sau BG) a acoperirilor implantologice [4,5], considerandu-se aceste conditii termodinamice ca reper logic (si propice) pentru formarea si structurarea filmelor bioceramice prin pulverizare in camp magnetron.

Caracterizari si evaluari fizico-chimice, mecanice si biologice: **(1)** Ordinea la mare distanta a filmelor de HA si BG a fost evaluata prin spectroscopie in IR cu transformata Fourier (FTIR) in modul reflexie total atenuata (ATR) cu ajutorul unui aparat Perkin Elmer BX Spectrum-Pike. Spectrele FTIR au fost realizate in domeniul de numere de unda 2000–500 cm⁻¹, la o rezolutie de 4 cm⁻¹, inregistrand 128 de scanari pentru fiecare proba. **(2)** Investigatiile structurale ale filmelor HA au continuat prin masuratori de difractie de raze X (XRD) folosind echipamentul Bruker D8 Advance care lucreaza cu

un fascicol paralel de raxe X folosind radiatia $\text{Cu K}\alpha_1$, in geometrie incidenta razata ($\alpha=2^\circ$) (GIXRD) si geometrie simetrica ($\theta-\theta$). Domeniul unghiular ales a fost $2\theta=9^\circ-55^\circ$ utilizand un pas de 0.04° , timp pe pas=31s. (3) Compozitia filmelor HA si BG preparate a fost estimata prin spectroscopie dupa dispersie de energie (EDS), utilizand un modul Bruker Quantax 200. Masuratorile au fost realizate in triplicat pe zone cu o arie de $100 \times 100 \mu\text{m}^2$, alese aleatoriu pe suprafata probei. Rezultatele analizei elementale cantitative au fost transformate in concentratii molare de oxizi. (4) Masuratorile capacitate-tensiune (C-V) si curent-tensiune (I-V) au fost efectuate la temperatura camerei si presiune atmosferica prin baleierea tensiunii de la 0 la 35 V si apoi invers, folosind o punte Hioki 3532-50LCR si respectiv un electrometru Keithley 6517. (5) Aderenta la substratul de Ti a filmelor de HA si BG sintetizate a fost estimata prin metoda pull-out, utilizand un instrument de masura standardizat PATHandy (forta maxima=1 kN) echipat cu elemente de testare din otel inoxidabil de $\Phi 2.8 \text{ mm}$. Masuratorile au fost realizate in acord cu standardele ASTM D4541 si ISO 4624, valoarea aderentei a fost stabilita in urma unui calcul statistic bazat pe raportul dintre forta inregistrata si suprafata de film desprinsa. (6) Testele de citocompatibilitate *in vitro* au fost efectuate in culturi de celule stem mezenchimale urmand directivele standardului dedicat: ISO 10993-5:2009.

Testele *in vitro* in culturi de celule stem mezenchimale au probat citocompatibilitatea excelenta a filmelor "HA" si "BG" preparate prin sinteza directa din precursori chimici asistata de plasma magnetron, asa cum demonstreaza rezultatele de proliferare MTS si citotoxicitate LDH. Morfologia celulelor este una etalata, avand forme si dimensiuni normale, asa cum evidentiaza imaginile de microscopie de fluorescenta.



Au fost fabricate cu succes, pentru prima data, filme monofazice de hidroxiapatita (cu structurari diferite functie de conditiile de depunere) si biosticla (cu diferite grade de conectivitate a retelei functie de compozitia aleasa) prin sinteza fizico-chimica asistata de plasma magnetron. Prin testele mecanice pull-out au fost relevate valori de aderenta ale filmelor HA si BG la substratul de Ti superioare valorii minime (15 MPa) impuse de standardul care reglementeaza acoperirile implantologice pentru aplicatii medicale cu incarcari mecanice mari (ISO 13779-2:2008). Testele de citocompatibilitate in culturi de celule (ISO 10993-5:2009) au evidentiat raspunsul biologic excelent al filmelor subtiri de HA si BG. Astfel, acest nou procedeu de sinteza directa pe implant a acoperirilor bioceramice ar putea introduce avantajul unui cost de productie/fabricatie mai redus si deschide noi perspective de continuarea a cercetarilor (prin depunerea de aplicatii in noile competitii de proiecte) pentru (i) verificarea limitelor tehnologice ale noii tehnologii de biofunctionalizare a implanturilor/dispozitivelor medicale si (ii) explorarea exhaustiva a calitatii si fezabilitatii acoperirilor bioceramice sintetizate.

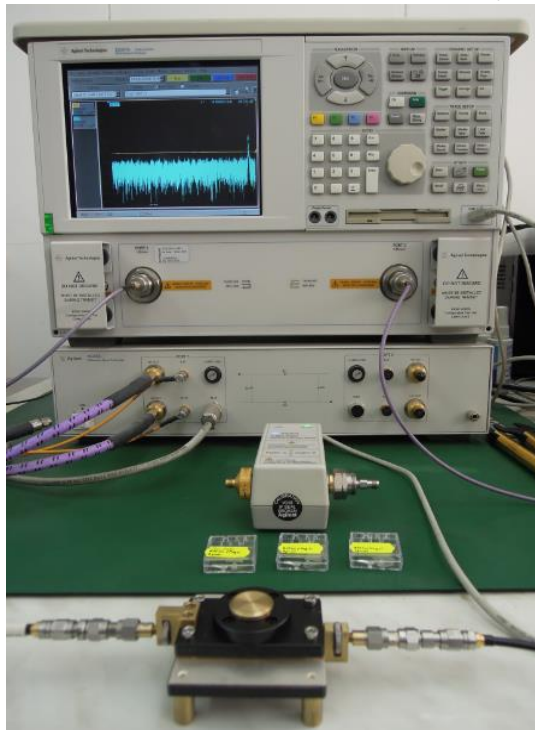
Un rol important in realizarea de noi materiale este jucat de masurarea straturilor feroelectrice in camp de frecvente ultrainalte. Fenomenele de relaxare la frecvente foarte inalte in feroelectrici sunt inca insuficient cunoscute datorita metodicii experimentale de o dificultate crescuta. Pentru caracterizarea in microunde s-au folosit metode rezonante de tip cavitate metalica sau cavitate SPDR. De asemenea, s-au fabricat structuri de tip CPW pentru analiza matricii parametrilor S (impedanta caracteristica si constanta de propagare) in vederea deducerii parametrilor de

material din datele din diagrama Smith a structurilor continand materialele de investigat. Datele obtinute au un impact semnificativ in vederea dezvoltarii unor materiale si dispozitive cu frecvente de lucru din ce in ce mai inalte in vederea acoperirii eficiente a spectrului electromagnetic disponibil.

Metodele folosite pentru investigarea straturilor feroelectrice au fost:

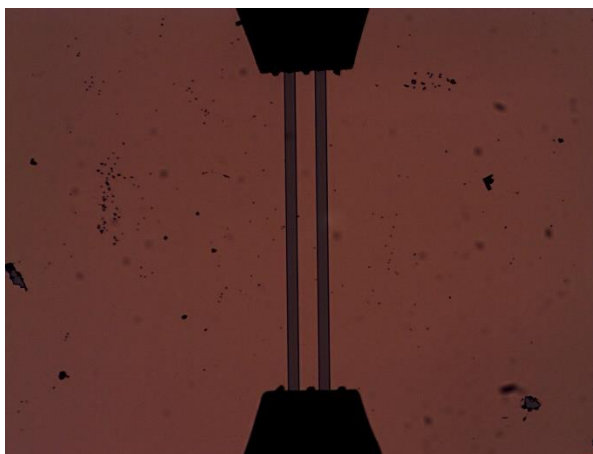
- Split Post Dielectric Resonator
- linii de transmisie CPW

Metoda SPDR (split post dielectric resonator) este o metoda rezonanta oferind o inalta precizie dar la o frecventa fixa si consta in introducerea stratului feroelectric deus pe substrat intr-o structura rezonanta care foloseste doi rezonatori dielectrici. Ca film feroelectric s-a folosit titanatul de strontiu si bariu deus pe substrat de oxid de magneziu (BST). Metoda are la baza un camp electric practic uniform intre cei doi rezonatori dielectrici. Din cauza sensibilitatii la grosimea substratului (in cazul nostru substrat cristalin de MgO orientat (100), initial se masoara exact substratul pe care se va depune filmul de BST. Depinzand de concentratia de strontiu si de grosimea stratului de BST tangentele ungiurilor de pierderi sunt similare, dar prezinta valori diferite pentru constanta dielectrica. Aceste diferente sunt o consecinta a cristalizarii diferite a probelor, esantionul cu grosimea mai mare avand, conform difractiei de raxe X efectuate pe ambele filme, o cristalizare mult mai buna. Acest rezultat confirma sensibilitatea deosebita a metodelor rezonante pentru determinarea parametrilor dielectrici. Prin urmare metoda SPDR va putea fi utilizata pentru estimarea parametrilor dielectrici intrinseci ai filmelor feroelectrice texturate si/sau epitaxiale.



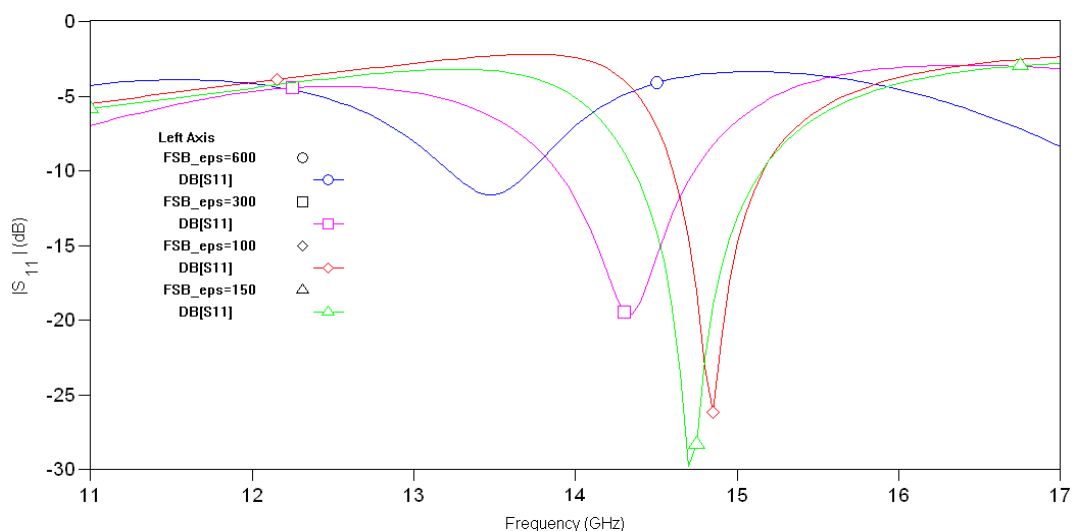
Metoda CPW consta in fotolitografierea unor linii de transmisie CPW peste stratul feroelectric deus. Sunt masurati parametrii S de diport, se deduc din acestia impedanta caracteristica a liniei si constanta de propagare a undei de-a lungul ei. Trebuie cunoscuti a priori parametrii dielectrici ai substratului pentru a afla pe cei ai stratului.

Unul dintre avantajele liniei coplanare consta in faptul ca atat linia centrala de semnal cat si semiplanele de masa din stanga si dreapta ei se afla in acelasi plan si pot fi contactate cu o microsonda de tip "infinity probe".



Masurarea liniilor CPW s-a facut folosind statia microproba Summit 11000B de la Cascade Microtech conectata la analizorul vectorial de retele PNA E8361 de la Agilent. Calibrarea s-a realizat folosind programul WinCAL si metoda de calibrare LRRM folosind elemente de calibrare pe un substrat standard.

Rezonatori liniari CPW atât de scurți ar prezenta rezonante la frecvente foarte ridicate in unde milimetrice in majoritatea cazurilor dincolo de limita superioara de 67 GHz atât pentru statia de microsonde Cascade a analizorului vectorial PNA E9361A de la Agilent.



Se poate observa ca, simultan cu cresterea permitivitatii stratului de titanat de bariu si strontiu, rezonanta se muta spre frecvente mai mici. In prima instanta linia CPW este mai bine adaptata cu cresterea permitivitatii, apoi devine din ce in ce mai slab adaptata. Din pacate, metoda rezonatorilor CPW nu a putut fi aplicata in aceasta etapa din cauza câmpului de vizualizare al microscopului care nu a permis contactul cu microsondele la distante mai mari de 1 mm.

Tot din domeniul materialelor noi cu rezultate brevetabile este si conversia energiei solare in substante chimice combustibile prin descompunerea fotoelectrochimica a apei.

Activitatile specifice acestei teme sunt:

- studiul teoretic privind producerea de fotoanodi pe baza de fer folositi in procesul de descompunere a apei si obtinere a hidrogenului
- prepararea si caracterizarea morfologica si structurala a unor materiale oxidice bazate pe fer si testarea electrochimica

Descompunerea electrolitica a apei cu generarea hidrogenului (H_2) si oxigenului (O_2) este un proces electrochimic ce foloseste energia electrica ca forta motrice a reactiilor chimice. Pentru a realiza o densitate de curent de $1 A/cm^2$, o valoare normala la electroliza apei, este necesara o tensiune a celulei de 1.85-2.05 V datorita supratensiunii de la anod si catod. Deoarece potentialul termodinamic necesar descompunerii apei in H_2 si O_2 este de 1.23 V, eficienta conversiei totale are limita superioara 60-66.5%, cu o pierdere de energie electrica de 33.5-40%. In plus electrolizoarele sunt scumpe. In consecinta, numai 4% din hidrogenul produs in lume este obtinut prin electroliza apei.

Conversia energiei solare in material combustibil este o metoda promitatoare pentru stocarea energiei solare. Celulele fotoelectrochimice (PEC) mimeaza fotosinteza in plante prin integrarea in acelasi dispozitiv a proceselor de captare a energiei solare si a celor de generare de combustibili moleculari, cum ar fi hidrogenul. Aceste sisteme fotosintetice artificiale pot fi realizate intr-o configuratie mai eficienta decat cele gasite in natura.

Celulele fotoelectrochimice bazate pe semiconductori reprezinta o clasa de dispozitive in care crearea perechii electron-gol datorata fotonilor incidenti determina reactia de oxido reducere (redox). Prin iluminarea semiconductorului cu lumina avand energii ale fotonilor in exces fata de band gap-ul semiconductorului, electroni din banda de valenta a semiconductorului vor trece in stari excitate de energie (banda de conductie) lasand vacante electronice, tratate drept cvasiparticule (goluri) cu sarcina pozitiva. Plasarea materialelor semiconductoare in contact cu metalele sau cu alti semiconductori creaza potentiale electrice la echilibru termic datorita energiilor Fermi diferite ale materialelor. Aranjarea atenta a jonctiunii semiconductorului permite manipularea densitatii golurilor si electronilor prin intermediul potentialelor electrice.

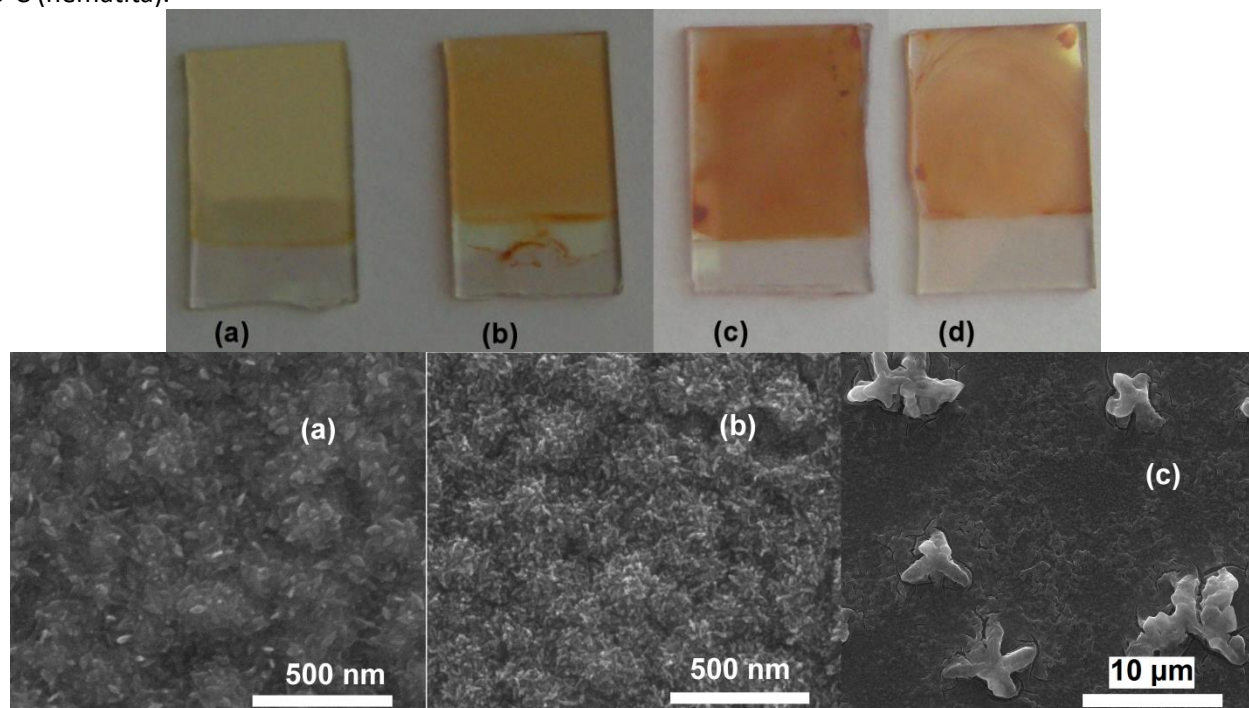
Pentru a se realiza descompunerea directa a apei semicelula trebuie sa indeplineasca simultan cateva criterii:

- 1) semiconductorul trebuie sa genereze un bandgap suficient ($E_g > 2.0$ eV) incat la iradiere sa descompuna apa;
- 2) bandgapul trebuie sa permita utilizarea eficienta a spectrului solar ($\lambda > 460$ nm);
- 3) potentialele de margine de banda trebuie sa se potriveasca cu potentialele de oxidare si reducere ale oxigenului si hidrogenului;
- 4) purtatorii de sarcina fotoindusi trebuie sa fie selectivi pentru descompunerea apei.

Intre materialele semiconductoare folosite in celulele fotoelectrochimice hematita ($\alpha\text{-Fe}_2\text{O}_3$) este considerata un material prototipic deoarece are un bandgap favorabil de circa 2.1 eV, stabilitate buna in mediul apos si este ieftin, ferul fiind unul din cele mai abundente materiale din natura. S-a apreciat ca eficienta teoretica a acestui material la descompunerea apei este de 16.8%.

Totusi, hematita are marginea benzii de conductie la un nivel energetic sub nivelul energetic al cuplului H^+/H_2 in timp ce banda de valenta este potrivita pentru producerea oxigenului. De aceea hematita este folosita in celulele fotoelectrochimice cu configuratia din Fig.2b sau daca se aplica un bias electric extern. Pe de alta parte, lungimea de difuzie a golurilor in hematita este mica (2-4 nm). Aceasta inseamna ca majoritatea fotonilor absorbiti de un strat gros de semiconductor nu va fi folosita la oxidarea apei la interfata solid – lichid. De aceea o abordare care a avut succes recent este folosirea de filme absorbante foarte subtiri.

Studiul nostru este orientat pe obtinerea de fotoanodi bazati pe oxid de fer folositi in dispozitive integrate de celule fotovoltaice (PV)/fotoelectrochimice (PEC). In figura de mai jos este prezentata o proba de FeOOH, un hidroxioxid de fer de culoare galben pal obtinut electrochimic pe substrat de FTO si o proba de FeOOH tratata termic la 525°C (hematita).



Filmul de FeOOH e constituit din nanoplachete, cu grosimi de circa 10 nm iar celelalte dimensiuni de 25-30 nm, prinse in sfere cu diametrul de aproximativ 300 nm. Aceasta este si grosimea filmului de hidroxioxid de fer pe FTO.

Proba de FeOOH tratata 2 ore la 525°C a condus la obtinerea unui film usor roscat de hematita. Imaginea SEM arata un film constituit din nanoplachete rotunjite incluse in sfere cu diametre mai mici (200-250nm) decat cele ale filmului de FeOOH. Intre sfere au aparut si unele spatii libere.

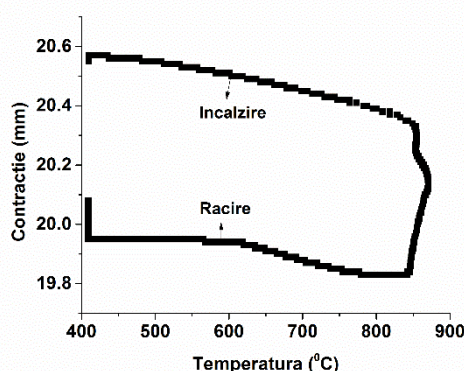
Filmul de hematita este instabil la potentiale mai negative de -0.5V/Ag-AgCl in solutia 1M NaOH (Fig.7a). Se observa pe aceasta voltamograma ca la potentiale mai mari de 0.56 V incepe procesul de degajare a oxigenului. Un fotocurent de 42μA/cm² este observat la potential de 0.8V/Ag-AgCl, in domeniul de potential de degajare a oxigenului, atunci cand electrodul de hematita (film cu grosime de maximum 250 nm) este iluminat cu un simulator solar in conditii standard AM 1.5.

Tot din categoria materialelor noi cu rezultate brevetabile fac parte si oxizii cu structura pervskitica procesati prin metode neconventionale rapide cu potentiale aplicatii in senzistica si/sau spintronica.

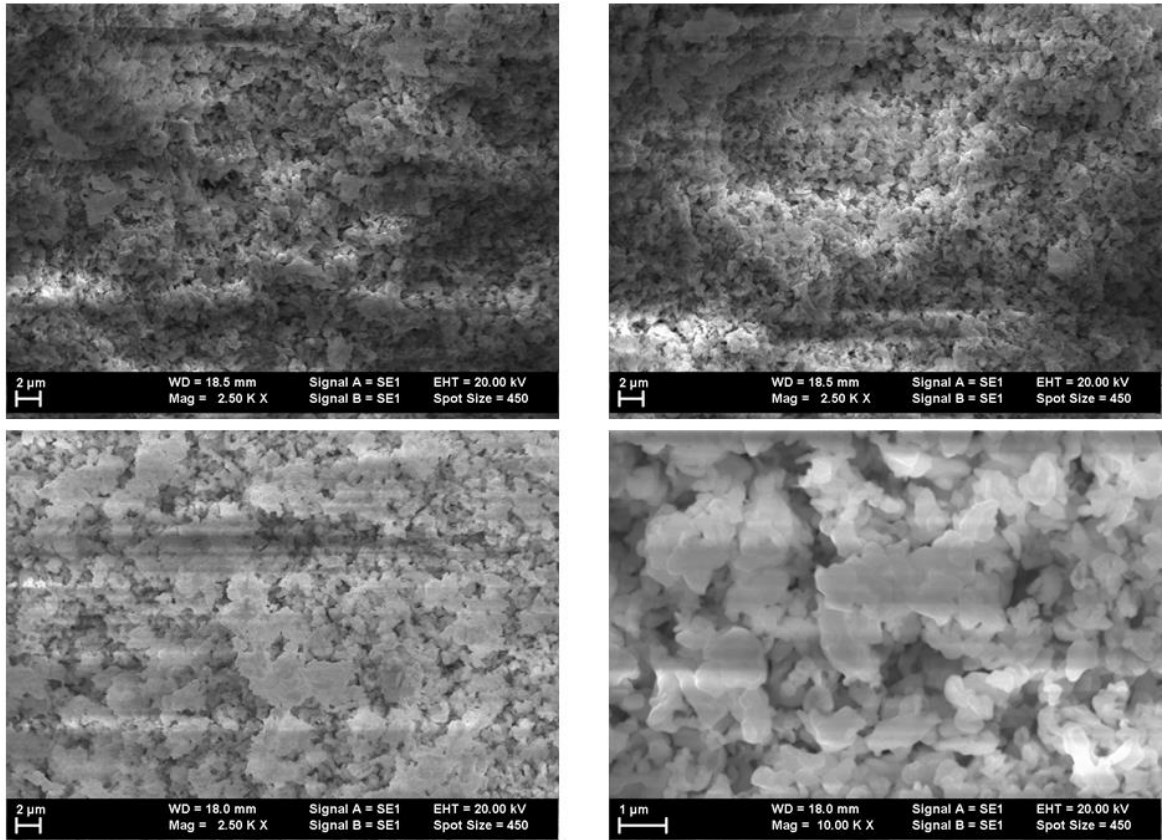
Acticitatile aferente acestei teme pot fi sintetizate astfel:

- studiu complex al variatiei proprietatilor structurale, magnetice, electrice si/sau optice in oxizi pervskitici procesati prin metode neconventionale rapide
- optimizarea proprietatilor fizico-chimice si a caracteristicilor morfo-structurale pentru compusii finali prin aplicarea sintezei si sinterizarii neconventionale
- metode complementare, moderne pentru a pune în evidență proprietățile complexe specifice acestor oxizi.

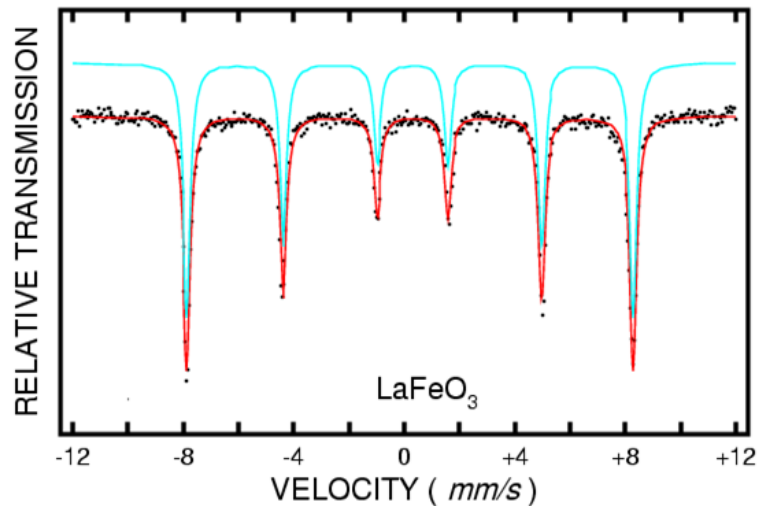
Ortoferita de lantan (LaFeO₃) a fost obtinuta in premiera prin Spark Plasma Sintering (SPS) o metoda neconventionala si foarte rapida de procesare. Pulberea precursora obtinuta prin amestecul direct al oxizilor de lantan si fier (La₂O₃: Fe₂O₃=1:1) a fost omogenizata timp de 5h in moara planetara Retch, dupa care a fost introdusa intr-o matrita de grafit si sinterizata SPS. Tratamentul termic de sinterizare a constat in incalzirea rapida a probei la temperatura de 850 °C cu o viteza de 250 °C/min aplicandu-se o presiune de 10 KN, mentinerea in palier timp de 3 minute dupa care proba a fost racita obtinandu-se o pastila cu diametrul de 20 mm. Pe parcursul tratamentului termic de sinterizare proba s-a densificat, avand o contractie de cca. 0.63 mm, asa cum reiese din figura, dar se observa si un fenomen de relaxare a materialului la racire.



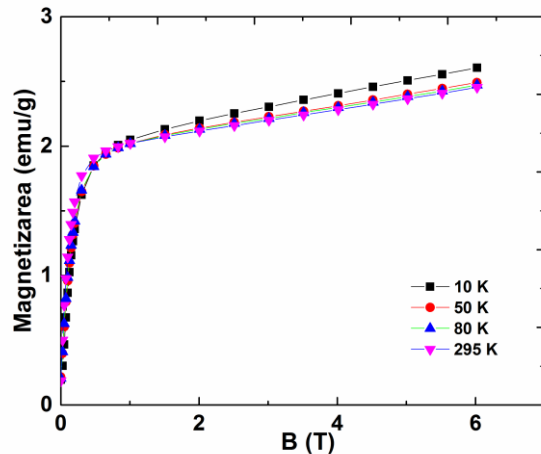
Imaginile SEM pentru ortoferita de lantan ((LaFeO₃) obtinuta prin Spark Plasma Sintering arata formarea unei structuri relativ compacte formata din agregate de aprox. 1-2 μm generate de clusterizarea cristalitelor. Acest fenomen este des intalnit la probele procesate prin SPS si se datoreaza presiunii mari aplicate pe proba in timpul incalzirii. De asemenea, pe suprafata probei se observa aparitia unor zone de topitura. Acest comportament se datoreaza exclusiv metodei de procesare, Spark Plasma Sintering, care utilizeaza pulsuri de curent cu intensitate mare. Compresia fizica prin aplicarea presiunii poate fi foarte mare deoarece in camera de tratament avem vid. Astfel avem de-a face cu o stare de temperatura ridicata locala care determina vaporizarea si topirea suprafetelor particulelor de pulbere.



Spectrul Mőssbauer pe proba de LaFeO_3 procesata prin SPS a fost achizitionat la temperatura camerei si este prezentat mai jos. Acesta prezinta 6 linii de absorbtie, ceea ce ne arata faptul ca avem o structura ordonata magnetic a probei analizate. Fitarea spectrului cu o retea cristalina arata prezenta unor linii inguste (largimea la semiinaltime este de 0.29 mm/s), campul hiperfin de ~ 50 T si deplasarea izomera de ~ 0.25 mm/s corespunzand ionilor de Fe^{3+} in stare de spin inalt. Valoarea campului hiperfin este usor mai mica comparativ cu cele raportate pana acum pe acest compus (~ 53 T pentru LaFeO_3 procesat clasic.)



O posibila explicatie pentru aceste valorile mai mici ale parametrilor hiperfini este legata de presiunile mari utilizate pentru procesare care compactizeaza / scurteaza legaturile metal–oxigen Astfel, atat distantele determinate din analiza Rietveld a datelor de difractie ($a= 5.21567 \text{ \AA}$, $b=4.865 \text{ \AA}$, $c=6.954 \text{ \AA}$) cat si unghiurile specifice legaturilor Fe-O-Fe sunt mai mici ceea ce duce la o diminuare a campului hiperfin. Investigarea proprietatilor magnetice s-a realizat prin masurarea magnetizarii in functie de campul magnetic aplicat la 4 temperaturi diferite: 10, 50, 80 si 295 K.



Analiza curbelor de magnetizare la toate cele 4 temperaturi arata prezenta unui comportament antiferomagnetic la temperaturi joase, comportament care se mentine si la temperatura camerei. Astfel, pentru proba procesata SPS a fost obtinuta o temperatura de tranzitie magnetica de 750 K catre o stare paramagnetica care este in concordanta cu datele raportate in literatura pentru acest compus.

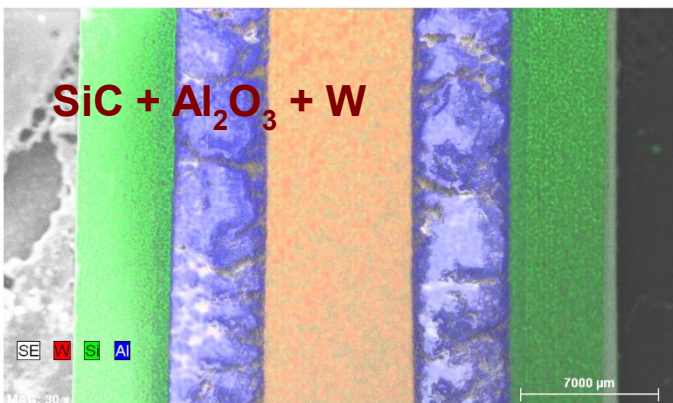
O clasa aparte de materiale noi sunt si compozitele metalo-ceramice stratificate pentru aplicatii in conditii extreme. In acest sens ne-am propus dezvoltarea de tehnologii de productie a materialelor metalo-ceramice sub forma de compozite stratificate pentru aplicatii in conditii extreme, urmarind-se crearea de noi materiale cu proprietati mecanice, termice si de rezistenta la coroziune imbunatatite. Tehnologiile propuse au in vedere realizarea de componente in forme apropiate finale adecvate aplicatiilor (geometrii complexe) si posibilitatile de conectare/imbinare ale acestora cu alte materiale structurale sau functionale.

Activitatile specifice au fost orientate spre:

- obtinerea de materiale tipice pe baza de wolfram
- caracterizarea acestor materiale in conditii extreme de temperatura

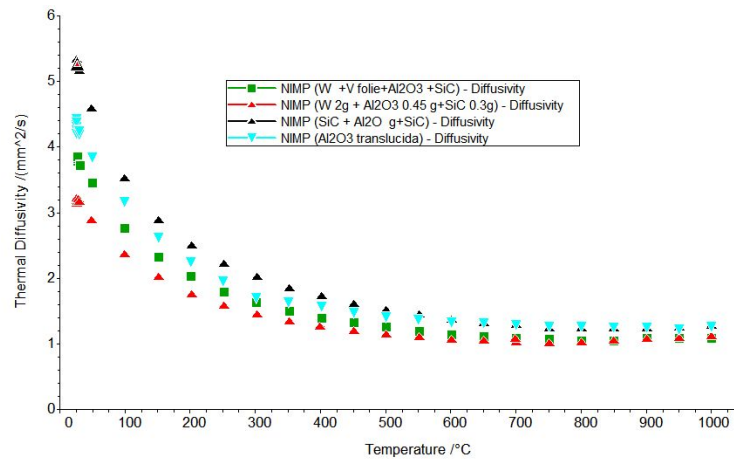
Au fost create materiale compozite de tip carbura de siliciu, alumina si wolfram care au avantajul unor coeficienti de dilatare termica redusi si cu valori apropiate, precum si complementaritatea unor proprietati fizice.

Pentru procesarea materialelor a fost aleasa in acest studiu metoda sinterizarii asistata de camp electric. Metoda aceasta are o serie de avantaje, permitand utilizarea atat a pulberilor metalice cat si a celor ceramice, precum si a unor materiale metalice de volum (bulk). In plus, este o metoda rapida (timp total de procesare de ordinul a 40-80 minute) si care, datorita vitezei de lucru, permite realizarea unor materiale nanostructurate in cazul in care pulberile utilizate sunt nanometrice. Nu in ultimul rand trebuie mentionate unele avantaje legate de materialele alese, in particular faptul ca permite sinterizarea aluminei in fora translucida si cu porozitatea extrem de mica si a unei plaje largi de proprietati pentru carbura de siliciu, de la materiale nanostructurate cu proprietati izolatoare termic si pana la materiale cu densitate maxima si conductie termica similara cu a celor mai bune metale conductoare.



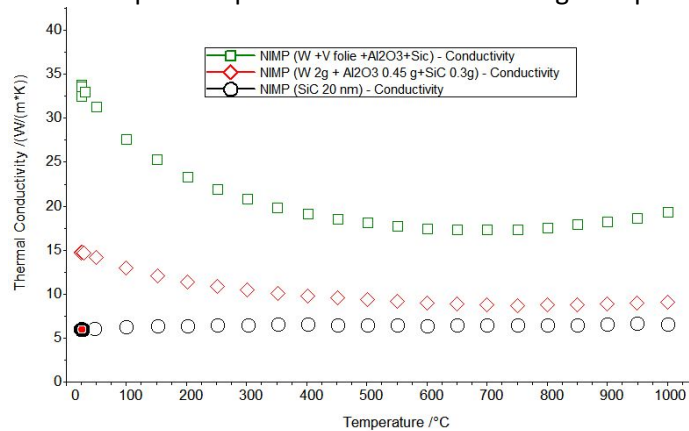
Pentru caracterizarea termica a materialelor produse a fost utilizat un analizator de proprietati termice de tip laser flash (Netzsch, LFA 457) capabil sa determine simultan difuzivitatea termica, caldura specifica si conductibilitatea termica a materialelor pana la 1100 C.

Au fost determinate difuzibilitatile termice ale compozitelor wolfram-alumina si wolfram-carbura de siliciu-alumina precum si rezistentele termice de contact ale acestor compozite.



Introducerea unui strat aditional de SiC nanostructurat, a carui morfologie permite o buna absorbtie a socurilor termice este de natura sa protejeze stratul de alumina si nu introduce o scadere a transportului termic comparativ cu alumina deja introdusa. De asemenea rezistenta termica de contact intre stratul alumina si SiC este neglijabila. Analiza termica a unui sistem de 3 straturi nu permite in mod evident determinarea rezistentei termice de contact. Pentru a verifica daca aceasta are un efect semnificativ a fost realizata in conditii identice o proba SiC-alumina-SiC. Pentru aceasta si pentru probele compozite a fost determinata difuzivitatea termica a stratului intermediar de alumina.

Analizand aceste rezultate putem concluziona ca introducerea unui strat tampon de V (sau eventual a altui strat de metal „soft”) are un efect benefic asupra procesului de realizare a compozitelor multistrat W/V-alumina-SiC, permitand acomodarea diferentelor dintre coeficientii de dilatate termica si preservand calitatea stratului de alumina. Stratul se suprafata din SiC nanostructurat permite protectia la soc termic si asigura o protectie suplimentara mecanica.



Compozitele stratificate obtinute au conductibilitati termice de ordinul a 20 W/m/K chiar si la temperaturi inalte (1000 C, vezi figura 6), aceste valori fiind perfect compatibile cu cerintele aplicatiilor din domeniul nuclear si substantial mai mari decat cele obtinute pentru majoritatea aliajelor metalice destinate temperaturilor inalte (10-15 W/m/K).

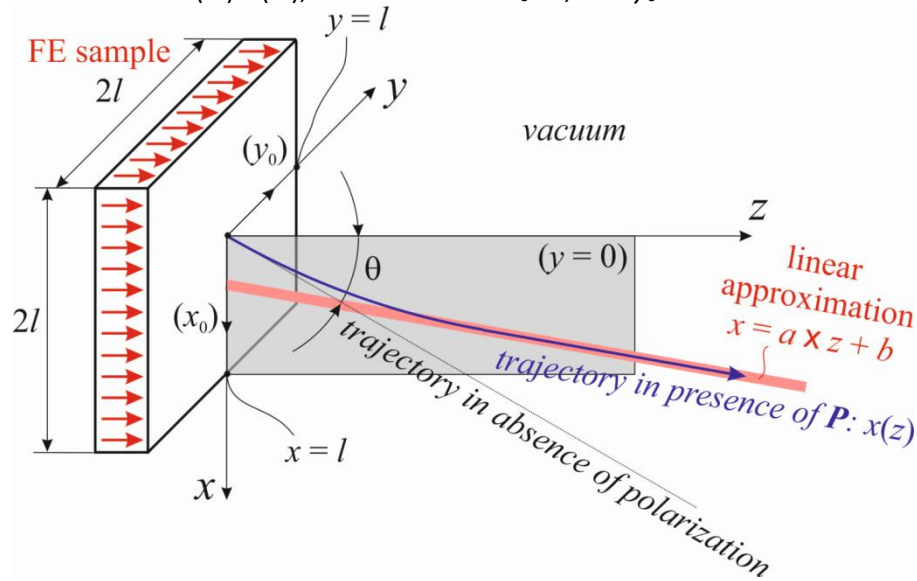
Dezvoltarea de noi tehnici de investigare a avut in principal cateva obiective specifice.

Unul dintre aceste obiective se refera la adaptarea tehnicii de difractie de electroni lenti (LEED) pentru studiul *in situ* al polarizarii feroelectrice a straturilor monocristaline. Tehnica de difractie de electroni lenti (LEED) este una din tehnicile standard de caracterizare structurala a suprafetelor monocristaline. Recent, grupurile din INCDFM (Heterostructuri si Suprafete) s-au dovedit a fi printre putinele din lume capabile sa sintetizeze si sa atinga un grad de curatenie extrem al straturilor feroelectrice monocristaline, astfel incat acestea sa prezinte imagini LEED. De aceea am realizat un studiu al interactiunii electronilor imprastiati de proba cu momentul dipolar macroscopic al probei, care conduce la deviatii ale traiectoriei de la linia dreapta si deci la pozitii diferite ale spot-urilor LEED fata de cazul absentei polarizarii. Studiul traiectoriei are atat fundament teoretic cat si experimental, iar rezultatul conduce la o noua posibilitate de a se determina starea de polarizare feroelectrica a probei, in functie de deviatia spot-urilor LEED de la pozitia lor in absenta momentului dipolar macroscopic.

Ca principale activitati realizate, mentional:

- Studiul teoretic privind suprafața feroelectrică
- Aplicarea rezultatelor teoretice la probele feroelectrice $\text{Pb}(\text{Zr,Ti})\text{O}_3(001)$ (PZT).

Suprafața feroelectrică este modelată în funcție de densitatea de suprafață a dipolilor elementari. Dacă P este polarizarea, A – aria suprafeței și d – grosimea, atunci momentul dipolar total este $p_{tot} = P \cdot A \cdot d$, și densitatea de suprafață a dipolilor este $P \cdot d$. Alegem (x, y, z) coordonatele unui punct în spațiu ($z > 0$) și $(x_0, y_0, 0)$ coordonatele care descriu suprafața feroelectrică cu aria $(2l) \times (2l)$, astfel încât $-l < x_0 < l, -l < y_0 < l$.



Presupunem că electronul este împrăștiat la un unghi față de normala la suprafață. Traectoria poate fi determinată prin integrarea ecuațiilor Newton ale mișcării (t fiind timpul scurs de la impactul cu suprafața, m masa electronului):

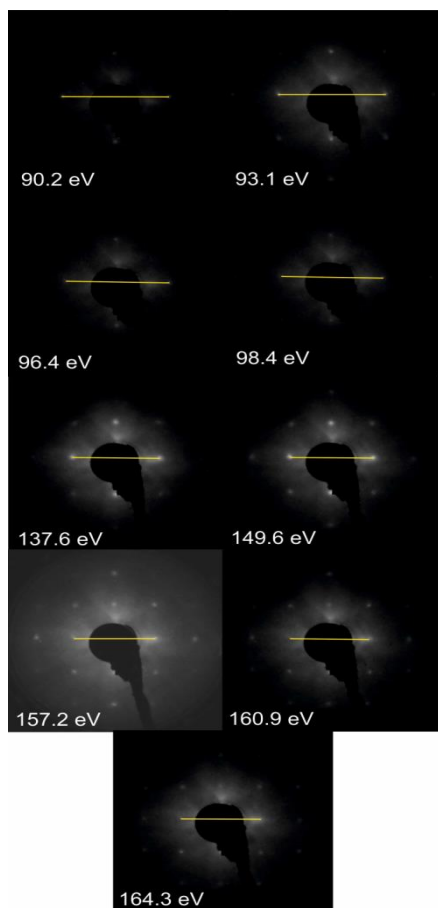
$$x(t) = v_0 t \sin \theta + \frac{1}{m} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' F_x(x(t''), z(t''))$$

$$z(t) = v_0 t \cos \theta + \frac{1}{m} \int_0^t dt' \int_0^{t'} dt'' F_z(x(t''), z(t''))$$

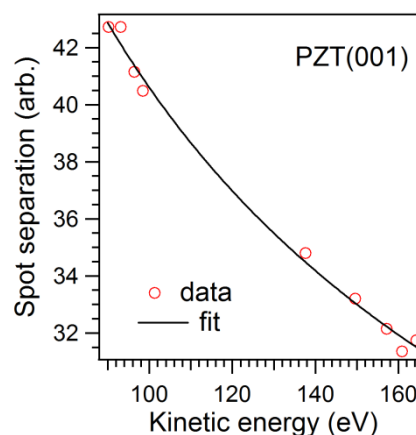
Ecuația traiectoriei se poate parametriza. În Raportul Extins se arată următoarele:

- Ecuația traiectoriei se poate determina prin iterații;
- La distanțe mari de probă $R / l \gg 1$, ceea ce se verifică în cazul practic, traiectoria asimptotică poate fi aproximată ca o linie dreaptă;
- Se pot determina parametrii traiectoriei asimtotice. Se propun aproximații analitice pentru aceste funcții;
- În consecință, se poate determina ușor poziția spoturilor LEED ca o funcție analitică.
- Este cunoscut din condiția de difracție, așadar din analiza poziției spoturilor LEED se poate determina. Energia cinetică a electronilor, iarăși, este cunoscută, deci putem deduce parametrul V_0 , caracteristică intrinsecă a materialului feroelectric.

Probele $\text{PZT}(20 \text{ nm}) / \text{SrRuO}_3 / \text{SrTiO}_3(001)$ au fost preparate prin PLD folosind un laser cu KrF. Instalația PLD nu este conectată la clusterul de vid ultraînalt; astfel a fost necesară găsirea unei proceduri de curățare: încălzirea la 400°C în presiune de 5×10^{-5} mbar O_2 , pentru 3 – 6 ore. Rezultatul acestei proceduri constă în obținerea unei bune stoichiometriei, $\text{Pb}(\text{Zr}_{0.2}\text{Ti}_{0.8})\text{O}_{\sim 2.84}$, rezultată din măsurători XPS. Observăm că există vacanțe de oxigen, așa cum ne așteptam, acestea fiind necesare ecranării câmpului de depolarizare. Acest lucru înseamnă că concentrația de purtători liberi este destul de mare în PZT, 10^{21} cm^{-3} . Astfel, ne așteptăm la un efect slab de încărcare la suprafață; acest lucru a fost testat în timpul experimentelor de fotoemisie prin variația intensității tunului de neutralizare și s-a observat o deplasare mică (sub 0.02 eV) între situația când nu folosim tunul de neutralizare și atunci când avem un curent de 2 mA. Măsurătorile XPS au arătat polarizare orientată înspre exterior.



Imagini LEED obținute pe PZT(001) la diferite energii, specificate pe fiecare imagine.



Fitul distanței între spoturile (01) pentru PZT (001).

Cunoscând $l = 2.5$ mm (cunoscut) și în urma fitului a rezultat $R = 128.35$ mm (în loc de 125 mm), $a_0 = 3.96$ Å (aproape de valoarea constantei de rețea în plan, 3.91 Å, măsurată prin microscopie electronică de transmisie de înaltă rezoluție) și cel mai important parametru din acest studiu $V_0 = -3.75$ eV. Simplul fapt ca s-au găsit valori mari pentru PZT, implică faptul că ipotezele noastre de perturbație a traiectoriilor de electroni prin prezența polarizării feroelectrice este rezonabilă. Mai mult, știm valoarea polarizării feroelectrice care este aprox. 1 C/m², așa cum este determinată în mod obișnuit pe toate probele sintetizate prin aceeași procedură. Din spectrele XPS, se observă că Pb 4f prezintă 2 componente, una cu energia de legătură la 137.79 eV și cealaltă la 138.72 eV, cu raport de aprox. 5:1. În comparație cu măsurătorile anterioare, componenta la energie de legătură mai mare este atribuită polarizării P⁽⁺⁾ și componenta mai mică este atribuită stării P⁽⁰⁾, curbura de benzi de 0.93 eV împreună cu valorile măsurate de polarizare 1 C/m² implică un raport $\delta/\epsilon_r \approx 8.2 \times 10^{-2}$ Å. Introducând $\delta \approx 20$ Å rezultă o valoare relativ ridicată a constantei dielectrice $\epsilon_r \approx 244$. Presupunând că $\delta = d = 0.66$ Å rezultă o valoare mult mai mică a constantei dielectrice $\epsilon_r \approx 8$.

2.2. Proiecte contractate:

Au fost contractate 3 proiecte:

Proiect 1: Fenomene si procese fizico-chimice in sisteme nanometrice complexe, suprafete si interfete;

Proiect 2: Sinteza si caracterizarea materialelor nanostructurate, straturilor subtiri si heterostructurilor;

Proiect 3: Materiale functionale si structuri cu impact tehnologic; noi dispozitive si metode de sinteza si de analiza.

Cod obiectiv	Nr. proiecte contractate	Nr. proiecte finalizate	2016

1. PN 16-4801	3	0	In anul 2016 au fost finalizate 43 de faze in cadrul celor 3 proiecte, dupa cum urmeaza: 13 in cadrul proiectului 1; 20 in cadrul proiectului 2; 10 in cadrul proiectului 3.
Total:			

2.3 Situația centralizată a cheltuielilor privind programul-nucleu : Cheltuieli în lei

	2016
I. Cheltuieli directe	
1. Cheltuieli de personal	
2. Cheltuieli materiale și servicii	
II. Cheltuieli Indirecte: Regia	
III. Achiziții / Dotări independente din care:	
1. pentru construcție/modernizare infrastructura	
TOTAL (I+II+III)	

3. Analiza stadiului de atingere a obiectivelor programului

(descriere)

Obiectivul general al programului Nucleu propus consta in acumularea de noi cunostinte privind fenomenele fizico-chimice care au loc in materiale avansate, nanomateriale si heterostructuri, in sinteza si caracterizarea de noi materiale si structuri functionale cu impact tehnologic, in analiza potentialului lor de aplicatii si in dezvoltarea de modele functionale si noi metode de sinteza sau analiza.

Obiectivul general prevede 3 tinte sau obiective tematice specifice, in conformitate cu prevederile planului de dezvoltare:

Obiectiv 1- **Modelarea si analiza fenomenelor si proceselor fizico-chimice in sisteme nano-dimensionale, suprafete si interfete**, cu urmatoarele componente:

- Efecte de dimensiune in nanomateriale, nanocompozite, si sisteme 2D
- Fenomene fizico-chimice la suprafate si interfete, cu implicatii in (foto)-cataliza, efecte fotovoltaice, senzoriala
- Modelarea si simularea materialelor si structurilor functionale folosind fizica computacionala
- Efecte corelative in materia condensata, proprietati supraconductoare, magnetice, feroelectrice si multiferoice
- Investigarea efectelor induse de diferite tipuri de radiatii asupra materialelor functionale si a dispozitivelor aferente, cu impact asupra caracteristicilor functionale

Acest obiectiv este realizat prin fazele aferente Proiectului 1 „**Fenomene si procese fizico-chimice in sisteme nanometrice complexe, suprafete si interfete**”. Astfel, in 2016 s-au obtinut urmatoarele rezultate:

- in cadrul fazei **Structura electronica și magnetica a semiconductorului magnetic diluat Mn/Ge(001)** in care ne-am propus ca obiectiv obtinerea de informatii suplimentare privind structura, reactivitatea și proprietățile electronice ale acestor compuși cu temperatură Curie ridicată, obiectivele au fost realizate integral. Întrucât pentru posibilitatea aplicațiilor în electronică și spintronică ale semiconductorilor magnetici diluați de temperatură Curie ridicată este absolut necesară o înțelegere exactă a feromagnetismului de temperatură Curie ridicată și a modului în care sunt distribuiți ionii în matricea semiconductoare gazdă, se poate spune că domeniul rămâne promițător cercetărilor ulterioare. Articolul rezultat din studiile raportate in faza, *Structural and magnetic properties of the (Ge,Mn) diluted magnetic semiconductor*, autori: L.C. Tănase, L.E. Ștofla, I.C. Bucur, N.G. Apostol, R.M. Costescu, C.A. Tache, D. Macovei, C.M. Teodorescu, G.A. Lungu, a fost acceptat pentru a fi publicat in J. Mater. Sci.
- obiectivele fazei **Studii privind proprietatile structurale si magnetice ale structurilor Ni/Ge(001)** au fost realizate integral. Rezultatele experimentelor efectuate pe diferitele grosimi de Ni depus prin MBE pe substrat de Ge incalzit si neincalzit ofera informatii despre mecanismele de crestere a Ni/Ge(001) si ne permit optimizarea depunerii nanofilmelor de Ni, pentru obtinerea unui sistem cu proprietati

structurale si magnetice care sa fie folosit in tehnologii cu Ge ca inlocuitor avantajos pentru Si si Ni ca feromagnetic ce s-ar putea incadra in aplicatii de spintronica.

- obiectivele fazei **Cartografierea la scala nanometrica a distorsiunilor structurale remanente in heterostructuri epitaxiale. Corelatii cu proprietatile electrice si magnetice ale heterostructurilor** au fost indeplinite integral. S-au utilizat tehnici avansate de sinteza si caracterizare microstructurala a materialelor pentru a evidentia corelatia dintre proprietatile structurale la scala nanometrica si proprietatile fizice la scala macroscopica: # Au fost realizate serii de probe sub forma de straturi subtiri epitaxiale prin depunere laser pulsata; # Probele au fost analizate prin microscopie electronica de inalta rezolutie (HRTEM) in sectiune transversala; # Imaginile HRTEM au fost procesate prin tehnici de procesare de imagine de ultima ora (Analiza de Faza Geometrica) pentru a extrage informatii cantitative privind distorsiunile structurale reziduale si cartografiere la scala nanometrica a campului de distorsiuni microstructurale in filme subtiri epitaxiale; # Au fost analizate datele experimentale in conformitate cu modelele teoretice existente privind cresterea straturilor subtiri si evolutia tensiunilor reziduale in functie de grosimea filmelor. Rezultatele obtinute deschid perspective noi privind continuarea investigatiilor de acest gen. Pe de o parte, din punct de vedere experimental, ar fi utila completarea datelor TEM obtinute pana in acest moment cu informatii suplimentare obtinute din regiuni diferite ale probelor TEM investigate, regiuni cu grosimi de lamela TEM diferite, pentru a verifica consistenta informatiilor cantitative obtinute in legatura cu posibila relaxare a sistemului in regiunile cele mai subtiri ale lamelei TEM. Pe de alta parte, data fiind limitarea spatiala a investigatiilor HRTEM desfasurate la distante de pana la 90 nm fata de interfata cu substratul, ar fi utila extinderea domeniului de grosimi investigate prin cartografierea *in-situ* a campului de distorsiuni folosind tehnici de difractie de electroni cu precesie, fie prin achizitionarea unui sistem de acest gen in cadrul INCDFM fie prin organizarea unor experimente in cadrul unor laboratoare dotate cu aceasta infrastructura. In al treilea rand, pentru stabilirea unor corelatii cat mai stranse intre procesele la nivel microstructural si proprietatile fizice macroscopice, se vor efectua modelari folosind platforma Comsol achizitionata in cadrul proiectului Nucleu. Rezultatele obtinute au fost prezentate in cadrul celei de a 6-a editii a International Conference on NANOstructures and nanomaterials SELF-Assembly NanoSEA 2016 organizata in perioada 3-8 Iulie la Giardini Naxos, Italia si sunt in pregatire doua manuscrise ce vor fi trimise la publicare in jurnale ISI.
- obiectivele prevazute in faza **Investigarea proprietăților magnetice si electrice in compusi cu structura dublu perovskit cu potential in aplicatii PV** au fost integral realizate. Astfel, am sintetizat in premiera compusul Ce_2CoMnO_6 prin metoda ceramica, pornind de la precursori oxidici. Am intreprins caracterizarea probelor din punctul de vedere al structurii, proprietăților magnetice, de transport electric si termodinamice la temperaturi joase de pana la 1.8 K si câmpuri magnetice intense de pana la 14 T. Am investigat proprietățile feroelectrice ale compusului la temperaturi joase, in interiorul fazei ordonate magnetic.
- obiectivul principal al fazei **Modelarea proprietatilor feroelectrice in straturi subtiri de oxizi ternari ABO_3 si AB_2O_5 ($A, B =$ metale de tranzitie nd) prin metode computationale in cadrul DFT**, si anume evidentierea dependentei polarizarii spontane in functie de grosimea unui strat de PTO FE de pe un substrat de STO, a fost realizata pentru sistemele nerelaxate. Calculele de polarizare cu relaxarea structurilor (pe modelele propuse, cu pana la 100 atomi/slab, cat si cu defecte) se realizeaza cu un efort computational mare pe clusterul prezent, cu 60 de nuclee fizice. Rezultate cu relaxarea structurilor vor fi disponibile pentru a completa datele prezente, raportate in faza. Remarcam ca au fost finalizate calcule similare pe sisteme complexe PTO- perovskit hibrid. Precizam ca obtinerea rezultatelor prezentate in faza in timpul scurt alocat acestor cercetari a fost posibila datorita utilizarii unei metode originale de calcul a polarizarii.
- obiectivele fazei **Modificarea parametrilor critici in supraconductori iradiati cu protoni** au fost de asemenea realizate in totalitate. Am pus in evidenta imbunatatirea proprietatilor de transport prin iradierea cu protoni de energie medie (10-15 MeV) a supraconductorului MgB_2 . Am caracterizat mecanismele de fixare a liniilor de camp obtinute prin iradiere cu protoni in probe masive.
- obiectivele fazei **Modificarea proprietatilor fotocatalitice in functie de parametri de sinteza a filmelor /straturilor subtiri de semiconductori oxidici** au fost indeplinite si am raportat urmatoarele rezultate:

- obtinerea sistemelor de oxizi metalici de tranzitie cu decoratii, ZnO decorat cu nanoparticule de CdS.
- Investigarea sistemelor obtinute dupa fiecare pas al sintezei prin UV-Vis, XRD, SEM, XPS pentru o cat mai buna caracterizare morfologica si structurala; de asemenea prin degradarea albastrului de metil s-au evidentiat performantele fotocatalitice ale heterostructurilor obtinute.
- modificarea condițiilor de sinteza, a concentratiei de CdS in scopul imbunatatirii performantelor fotocatalitice ale heterostructurilor de ZnO-CdS obtinute.
- obiectivele fazei **Nanomateriale cu proprietati magnetice sau fotocatalitice pentru aplicatii in terapii antitumorale prin hipertermie si/sau procese redox** au fost realizate integral. Au fost identificate metode de sinteza pentru nanomateriale magnetice si fotocatalitice cu proprietatile urmarite. Avem in vedere continuarea acestor cercetari prin imbunatatirea si eficientizarea metodelor identificate, ca si prin efectuarea unui studiu de fotocataliza in campuri magnetice variabile si sinteza de nanostructuri core-shell cu miez magnetic si invelis de TiO₂.
- studiile raportate in faza **Studiul transferului de sarcina si al reacțiilor chimice in sisteme biologice** au pus in evidenta pe de o parte posibilitatea imobilizarii proteazomului in matrice de gel la suprafata electrozilor de carbon nanostructurat, pe de alta parte studiile de spectroscopie UV-VIS si FTIR, cele de microscopie electronica de baleiaj si de forta atomica au aratat ca procesul de imobilizare poate duce la modificari conformationale ale enzimei iar studiile voltametrice au indicat o scadere a activitatii enzimatic. Cu toate acestea, masurari voltametrice in solutii incubate arata posibilitatea utilizarii tehnicilor electrochimice pentru studiul cineticii enzimatic. De asemenea, voltametria a fost folosita cu succes in determinarea efectului inhibitor al unor produse naturali si de sinteza cu proprietati farmaceutice. Obiectivele fazei au fost astfel integral realizate.
- in faza **Proprietati topologice ale fosforenei manifestate in regim de transport cuantic** am demonstrat analitic ruperea de simetrie electron-gol si am pus in evidenta rolul jucat in modelul electronilor strans legati de elementul de hopping t_4 , singurul care violeaza bipartitismul rețelei. In cazul ribbonului zig-zag am demonstrat analitic degenerarea starilor de margine topologice localizate pe margini opuse si am aratat ca degenerarea este ridicata de catre un camp magnetic perpendicular. Prin simularea unui dispozitiv Hall am scos in evidenta comportamentul ne-chiral al starilor de margine topologice, iar seria de peakuri din conductanta longitudinala releva caracterul disipativ al acestor stari. Obiectivele propuse au fost realizate si concretizate intr-o lucrare publicata in Physical Review B (2016). Tematica este de mare actualitate in fizica starii condensate in perspectiva evidentierii proprietatilor topologice. Din punctul de vedere al acestor proprietati, de mare interes este aplicarea tehnicilor de Hamiltonian ne-Hermitic pentru intelegerea efectului Hall cuantic, precum si influenta defectelor si efectele dezordinii asupra starilor topologice in prezenta/absenta campurilor magnetice.
- obiectivele fazei **Controlul optic si electric al starilor excitonice si biexcitonice** au fost indeplinite in totalitate. Rezultatele obtinute se subsumeaza cercetarii fundamentale, prezic efecte care pot fi observate cu tehnicile experimentale actuale si au fost publicate intr-o revista cu factor de impact 3.5 (Physical Review B, 2016). De asemenea rezultatele au fost prezentate in cadrul Congresului Societatii de Fizica din Turcia si constituie un capitol distinct al tezei Drd. Radu Dragomir care este si coautor al lucrarii publicate.
- obiectivele fazei **Forța cuantica de respingere intre pereti metalici sau semiconductori. Modele electronice de fractura mecanica** au fost realizate integral. S-a conturat teoria statistică a gazului de electroni liberi în prezența unei bariere subțiri de potențial care începe să separe două părți din material. La distanțe extrem de mici, forța cuantică este atractivă iar de la o anumită distanță de ordinul distanțelor interplanare din cristal ea devine repulsivă. Valoarea absolută a forței cuantice la distanțe de ordinul Ångströmilor sau nanometrilor este mult mai ridicată decât forța Casimir. O altă consecință a calculelor din acest studiu este o demonstrație intuitivă a faptului că metalele prezintă ductilitate, iar semiconductorii și izolatorii sunt materiale casante. De asemenea, cazurile practice analizate (pentru metale) se plasează în vecinătatea punctului unde presiunea cuantică își schimbă și schimbă semnul. În momentul de față, este în curs de elaborare manuscrisul *Quantum repulsive force between two metal plates filled with nearly free electrons*, care va fi trimis spre publicare la Nature Physics, ca o primă opțiune. In continuare, vor trebui efectuate experimente de tipul celor imaginate

pentru verificarea efectului Casimir, însă pe suprafețe metalice sau semiconductoare ultracurate și la distanțe de ordinul nanometrilor. Va trebui adaptat un nano-actuator piezoceramic de tipul celor folosite la un microscop cu efect tunel pentru efectuarea deplasărilor nanometrice, împreună cu o măsurare a forțelor tot prin efect piezoelectric. Dispozitivul va trebui să funcționeze în vid ultraînalt. Un alt efect care va trebui investigat este menținerea neutralității electrice la ruperea materialului, în cazul izolatoarelor și semiconductoarelor. Pentru aceasta vor trebui efectuate măsurători electrice ultrarapide corelate cu un dispozitiv de încercări mecanice, unde prinderea materialului supus efortului la întindere să fie realizată cu dispozitive izolate electric; și în acest caz dispozitivul de încercare va trebui să funcționeze în vid ultraînalt.

- în cadrul fazei **Mecanisme activate termic implicate în formarea nanocristalelor de (LiYF₄) dopate cu pamanturi rare prin metoda sol-gel** au fost studiate mecanismele de cristalizare a nanocristalelor de LiYF₄ dopate cu Yb/Er obținute prin metoda sol-gel urmata de calcinare și analizate folosind diverse modele: Friedman, Ozawa-Flynn-Wall și modelul „celei mai bune fitari” corelate cu date experimentale de difractometrie și microscopie electronica SEM. Ambii parametrii cinetici (energia de activare și factorul pre-exponențial) scad ușor în cazul modelelor Friedman, Ozawa-Flynn-Wall dar în același timp ambele modele susțin faptul că cristalizarea are loc „într-un singur pas”. Conform modelului „best-fit” nanocristalele de LiYF₄ sunt rezultatul unui proces autocatalitic în care faza amorfă suferă un proces rapid de cristalizare. Pe lângă faza cristalină principală LiYF₄ s-a observat o a doua fază (YF₃), care este metastabilă și acționează ca un catalizator pentru procesul de cristalizare al fazei principale. Obiectivele prezentei faze au fost realizate și se propune continuarea cercetărilor în direcția sintezei de nanostructuri unidimensionale tip „baghete” folosind metoda „sablon” (template) și studiul influenței dimensionalității reduse asupra proprietăților optico-spectrale (FTIR, fotoluminescența, timpi de viață ai luminescenței). Datele obținute vor fi corelate cu cele obținute în cazul unidimensional (de ex. nanocristale) și materiale microcristaline.

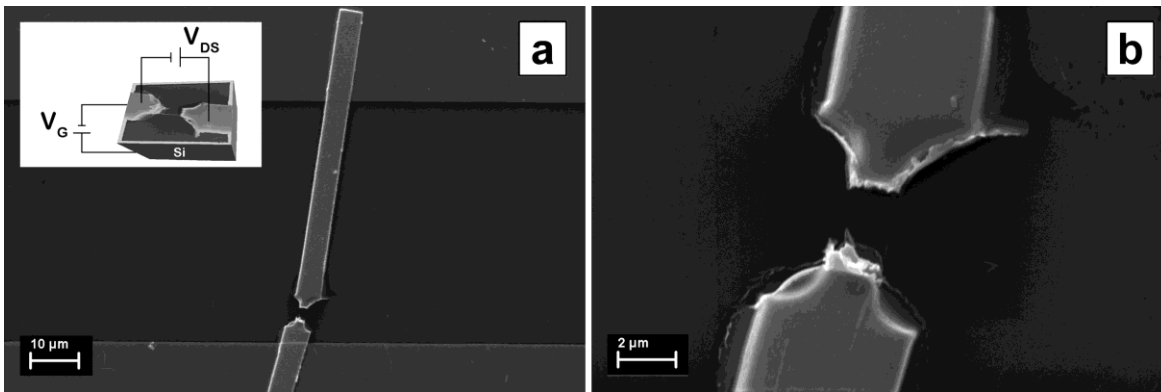
Obiectiv 2- Sinteza și caracterizarea nanomaterialelor și nanostructurilor, cu următoarele componente:

- Fenomene fizico-chimice la interfața cu sisteme vii
- Sinteza și caracterizarea de nano-obiecte din materiale funcționale cu potențial de aplicații high-tech
- Noi funcționalități derivate din combinarea de materiale disimilare în structuri complexe
- Sinteza și caracterizarea de nanocompozite cristaline și non-cristaline cu potențial tehnologic
- Sinteza de materiale și analiza comportamentului materialelor funcționale în condiții extreme de mediu

Acest obiectiv este realizat prin fazele aferente proiectului 2 **Sinteza și caracterizarea materialelor nanostructurate, straturilor subțiri și heterostructurilor**, rezultatele obținute în 2016 fiind sintetizate mai jos:

- Faza: **Sinteza chimică în mediu slab bazic a nanofirelor de ZnO pentru aplicații de tip tranzistori cu efect de câmp**. Obiectiv: Obiectivul prezentei faze constă în obținerea printr-o metodă chimică a unor nanofire de ZnO în vederea integrării acestora în dispozitive de tip tranzistor cu efect de câmp. Obiectivul de cercetare programat pentru această fază a fost integral îndeplinit.

Realizat: sunt prezentate date experimentale noi privind sinteza chimică în mediu slab bazic și proprietățile structurale, optice și morfologice a nanofirelor de ZnO, precum și integrarea unor nanofire singulare de ZnO în dispozitive de tip tranzistor cu efect de câmp având poarta sub canalul semiconductor. S-a pus în evidență faptul că după nanofirele de ZnO releva semnăturile caracteristice acestui semiconductor (faza hexagonală, largimea benzii interzise și banda de emisie în domeniul vizibil). Folosind electrozi interdigitați metalici de Ti/Au și prin utilizarea tehnicii EBL au fost contactate și măsurate în configurația de tranzistor cu efect de câmp având nanofire singulare de ZnO. Măsurătorile electrice realizate pe un singur nanofir de ZnO înainte și după pasivarea cu un strat de PMMA au evidențiat îmbunătățirea caracteristicilor după etapa de pasivare a starilor de suprafață (ex.: I_{ON}/I_{OFF} de la 10^6 la 4×10^6 ; V_T de la -4 V la -1 V; S de la 342 mV/decada la 269 mV/decada), tranzistorul fabricat operând în regim de putere mică și având timpi mici de comutare, caracteristici foarte importante pentru aplicații.



- Faza: **Sinteza, caracterizare morfologica si proprietati luminescente ale heterostructurilor de BaFBr-Er³⁺@SiO₂.** Obiectivul fazei: Obiectivul studiului se refera la sinteza heterostructurilor de tip BaFBr-Er³⁺@SiO₂ si caracterizarea proprietatilor luminescente (de tip de „up-conversie”). Obiectivele prezentei faze a fost atinse si se propune continuarea cercetarilor in directia intelegerii rolului jucat de concentratia Er³⁺ si imbunatatirii proprietatilor optice (de “up-conversion”) ale acestor prin co-dopare cu Yb³⁺.

Realizat: S-au sintetizat pentru prima data nanoparticule de BaFBr:Er³⁺ prin metoda precipitarii si heterostructuri “core-shell” BaFBr:Er³⁺/SiO₂. S-a dovedit utilitatea acoperirii acestor nanoparticule cu SiO₂ pentru evitarea aglomerarii si mentinerea/imbunatatirea stabilitatii chimice si a proprietatilor luminescente. S-a observat ca la pompaj cu radiatie laser 800nm atat nanoparticulele de BaFBr:Er³⁺ cat si heterostructurile “core-shell” BaFBr:Er³⁺/SiO₂ prezinta fenomenul de luminescenta de tip UC (“up-conversion”) asociat ionului Er³⁺ in care sunt implicati doi fotoni; eficienta relativa in ultimul caz fiind de aprox. 2%.

- Faza: **Magnetism si polarizare de spin in noi compusi Heusler.** Obiectiv: Prezenta faza a proiectului propune analiza teoretica a unor compusi full-Heusler noi, pe baza de zirconiu care prezinta atat proprietati de semimetale atipice cat si un moment magnetic total nul in starea fundamentala. Analiza se face pe baza teoriei functionale de densitate (Density Functional Theory - DFT). Aceste aliaje au fost numite ferimagneti semimetalici atipici complet compensati (Spin Gapless Completely Compensated Ferrimagnets - SG-CCF). Compusii pe baza de zirconiu au fost selectati deoarece prezinta toxicitate redusa, ceea ce permite prepararea experimentală si procesarea lor convenabila. Obiectiv realizat integral.

Realizat: In cadrul prezentei faze a proiectului au fost analizate mecanismele de ordonare magnetica in compusii full-Heusler Zr₂MnZ (Z= Ga, In), printr-un studiu teoretic avand la baza teoria functionale de densitate (Density Functional Theory DFT), folosind metoda de aproximare a gradientului generalizat (Generalized Gradient Approximation GGA) cu schema Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) pentru potentialul de schimb si de corelatie implementata in programul de calcul Wien2k. S-a demonstrat ca aliajul full-Heusler Zr₂MnAl cumuleaza doua proprietati interesante (ferimagnetismul semimetalic atipic si momentul magnetic total compensat). Prin calculul densitatilor de stari, s-a obtinut la nivelul Fermi compusul prezinta o banda interzisa determinata de purtatorii de spin majoritari (spin-up) si o banda interzisa inchisa formata de purtatorii de spin minoritari (spin-down). Momentul magnetic rezultat al atomilor de mangan este compensat de suma dintre momentul asociat atomilor de zirconiu si respectiv momentul asociat regiunii interstitiale, respectand curba Slater Pauling. In concluzie acest material nu genereaza campuri magnetice la distanta si de aceea poate conduce la simplificarea si micșorarea valvelor de spin actuale.

- Faza: **Obtinerea si caracterizarea fizico-chimica a unor straturi bioceramice cu proprietati antimicrobiene.** Obiectiv: Unul dintre obiectivele majore ale acestui studiu este de a dezvolta un material care ar putea imbunatati viata pacientilor care sufera interventii chirurgicale ortopedice majore, prin reducerea riscului aparitiei infectiilor postoperatorii. Astfel, principalul obiectiv al fazei a constat in obtinerea unui material bioceramic pe baza de hidroxiapatita dopata cu argint (AgHAp) si tetraciclina sau ciprofloxacina printr-o metoda simpla si la costuri mici ce poate fi folosit pentru aplicatii medicale. Obtinerea prin metoda sol-gel a straturilor bioceramice antimicrobiene pe baza de hidroxiapatita dopata cu argint cu tetraciclina si/sau ciprofloxacina a fost unul dintre obiectivele majore. Caracterizarea fizico-chimica a acestor straturi a reprezentat cel de-al doilea obiectiv major al acestei faze. Mai mult, sperăm că imbinarea metodei tradiționale pentru tratarea infectiilor cu antibiotice sintetice si a metodei de tratament cu ajutorul antibioticelor naturale va crește șansa de a lupta impotriva infectiilor bacteriene. Rezultatele prezentate in

cadru raportului de faza confirma indeplinirea atat a tintelor stabilite cat si a indicatorilor asociati monitorizarii si evaluarii prin publicarea a doua articole in jurnale cotate ISI.

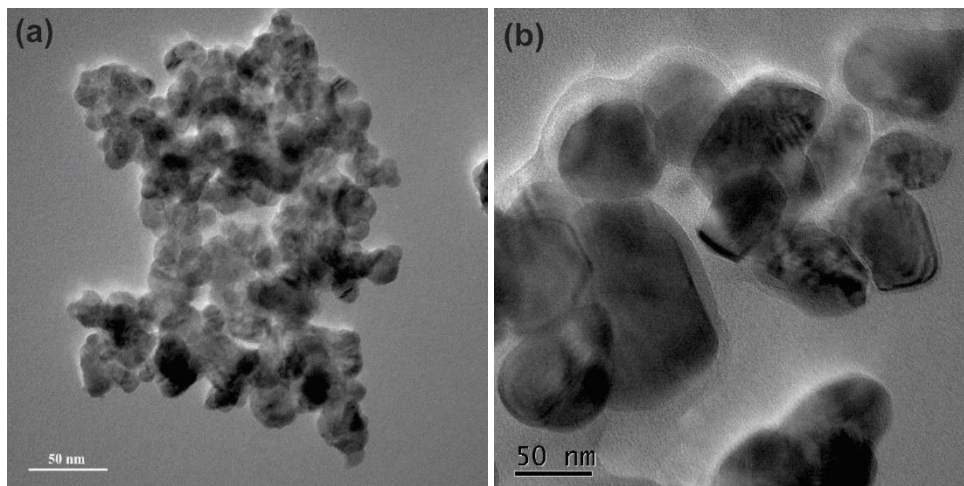
Realizat: Prin prezentul studiu s-a reusit furnizarea de date concrete cu privire la realizarea straturilor bioceramice cu proprietati antimicrobiene. Desi accentual cade pe aspectele specific procesului de fabricare a acestor straturi s-a realizat si o corelare complexa a proprietatilor fizico chimice specific acestor material. Scopul acestui studiu a fost acela de a explica rolul si necesitatea elaborarii si caracterizarii acestor noi materiale in vederea cresterii imbunatatirii vietii.

- Faza: **Proprietati electrice in straturi feritice de tip CFO si NFO.** Obiectiv: investigare proprietati electrice in unele straturi feritice crescute prin PLD pe suporti monocristalini de STO. Feritele de tip CFO si NFO sunt foarte bine caracterizate din punct de vedere al proprietatilor magnetice, dar informatia despre proprietati electrice (ex. constanta dielectrica, rezistivitate, mecanism de conductie la RT) este saraca sau lipseste. Prezenta faza isi propune sa aduca cunostinte noi in acest domeniu. Obiectivele fazei au fost atinse si proiectul continua fara probleme in ceea ce priveste finalizarea cu succes a lucrarilor pe anul in curs.

Realizat: Raspunsul electric al straturilor subtiri de ferita este puternic influentat de tensiunea aplicata, de temperatura si de tipul electrozudului inferior. Influenta temperaturii si a tensiunii a fost studiata pe un strat de NFO cu grosimea de 5nm in care s-a observat prezenta fenomenului de comutare rezistiva bipolara la temperaturi joase. Acest fenomen se poate explica prin prezenta unui nivel energetic situat in vecinatatea benzii de valenta dat de un defect din material care se comporta ca centru de captare pentru goluri. La temperatura camerei acest nivel este neutru si nu afecteaza conductivitatea electrica, insa induce fenomene de captare-emisie prin ciclarea tensiunii si prin scaderea temperaturii probei sub 150K. Fenomenul de comutare rezistiva se degradeaza prin incalzirea probei la 400K sau prin ciclari repetate ale tensiunii. In urma acestei degradari curbele I-V se modifica, valorile barierei de potential extrase din masuratorile I-V scazand de la 0,2eV la 0,1eV. Curbele de dispersie a capacitatii/pierderi dielectrice sugereaza prezenta mecanismelor de relaxare date de sarcina spatiala. In cazul straturilor de ferita de cobalt, tranzitiile de faza ale electrozudului inferior afecteaza forma curbelor de variatie a capacitatii functie de temperatura la frecvente mai mici de 1MHz. Masuratorile efectuate la temperaturi mai mari de 390K sugereaza faptul ca straturile de CFO de 30nm au caracter semiconductor.

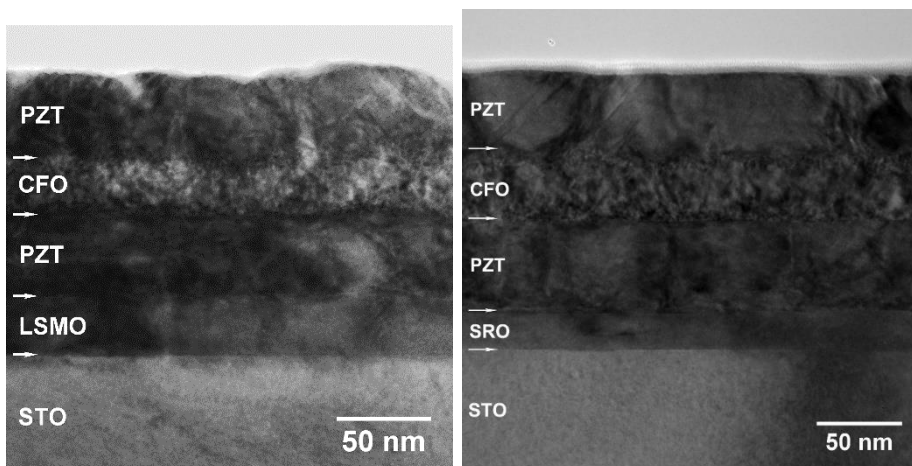
- Faza: **Obtinerea SnO₂-CuO-WO₃. Caracterizarea structurala si morfologica a sistemului ternar. Investigatii preliminare ale proprietatilor gaz-senzitive in conditii habituale.** Obiectiv: Prin tematica abordata ne propunem sa gasim o solutie de monitorizare a noxelor habituale utilizand sistemul ternar SnO₂-CuO-WO₃. Alegerea celor trei oxizi se bazeaza pe proprietatile specifice gaz-senzitive ale fiecaruia in parte, iar combinarea lor are drept scop depasirea limitarilor curente. Obiectivele pe care ni le-am propus pentru prezenta faza au fost integral realizate.

Realizat: S-a preparat sistemul ternar SnO₂-CuO-WO₃ si s-a demonstrat potentialul aplicativ extrem de ridicat pentru detectia H₂S in conditii habituale. **Principale rezultate:** SnWCu600 si SnWCu800 prezinta proprietati senzitive in detectia H₂S la temperatura de 100°C, inferioara temperaturilor obisnuite ale senzorilor chemorezistivi, respectiv 330°C. Cu alte cuvinte, puterea consumata este de 3 ori mai mica; timpii de raspuns sunt in medie de 5 minute pentru expunerea la H₂S (indiferent de concentratie). Altfel spus, sunt in marja caracteristica senzorilor comerciali; revenirea la rezistenta initiala este conditionata de aplicarea unui puls de temperatura de 500°C. Din punct de vedere aplicativ acest lucru implica o integrare relativ simpla intr-un modul electronic; semnalul de sensor scade cu cresterea umiditatii relative, dar se mentine de ~10⁶ pentru pragul de alarmare de 20ppm H₂S. Valoarea semnalului este cu 4-5 ordine de marime mai mare decat media comerciala; ambele materiale prezinta sensibilitatea selectiva mare la H₂S in raport cu potentialele gaze interferente: NO₂, CO, CH₄, NH₃, SO₂.



- Faza: **Efecte de interfata in structuri complexe feroelectric-feromagnetic.** Obiectiv: Se urmareste cum schimbarea stratului care joaca rol de electrod de baza in structuri complexe feroelectric-feromagnetic afecteaza proprietatile structurale, electrice si magnetice. Se au in vedere materiale feroelectrice de tip PZT sau BTO si ferite de tip CFO sau NFO. Ca substrat va fi folosit STO monocristalin, iar electroda de baza va fi SRO sau LSMO. Astfel de structuri pot prezenta proprietati fizice multiple precum multifericitate, cuplaj megnetoelectric, bistabilitate rezistiva. Toate activitatile propuse in aceasta faza de nucleu au fost derulate, iar obiectivul fazei a fost atins.

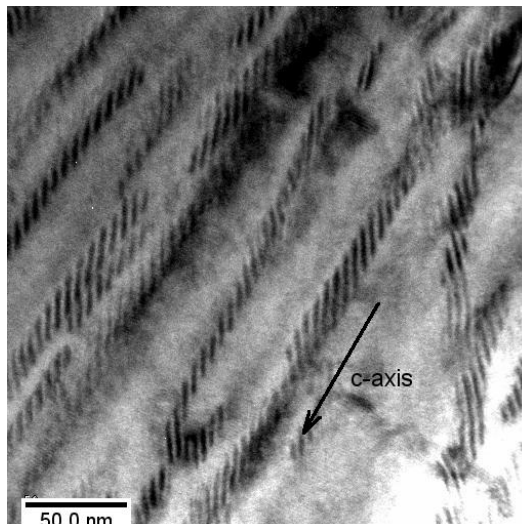
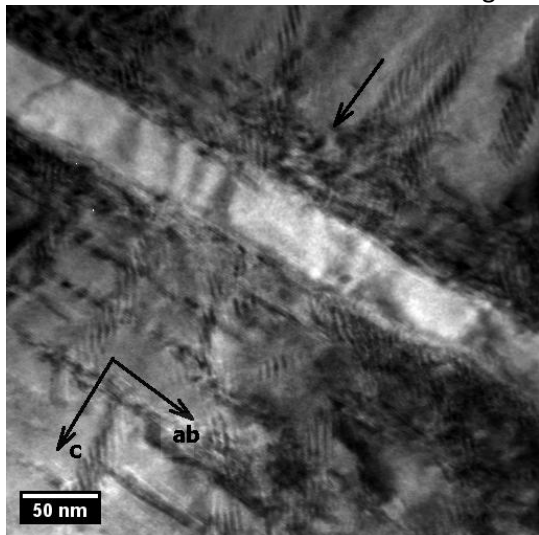
Realizat: Au fost crescute structuri complexe PZT-CFO-PZT pe suport SRO si LSMO. Masuratorile magnetice si electrice au evidentiat influenta suportului asupra proprietatilor macroscopice, rezultate mai bune fiind obtinute in cazul SRO.



- Faza: **Sinteza si caracterizarea heterostructurilor de tip izolator/supraconductor nanostructurat.** Obiectiv: Obiectivul fazei consta in fabricarea si caracterizarea exhaustiva a unor heterostructuri supraconductor/izolator compuse din supraconductori nanostructurati ($\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ dopat cu BaZrO_3) si SrTiO_3 . Heterostructurile vor fi realizate prin depunere cu laser pulsant, si vor fi caracterizate prin microscopie de transmisie, masuratori de transport electric in diverse campuri magnetice si la diverse orientari. Astfel de structuri sunt interesante pentru cresterea curentului critic si a potentialului de fixare a liniilor de camp magnetic, precum si pentru micșorarea anizotropiei curentului critic in functie de directia campului magnetic, parametri importanti la realizarea de solenoizi si magneti supraconductori. Toate tintele stabilite si indicatorii asociati pentru monitorizare si evaluare au fost indepliniti. Pentru viitor se are in vedere aprofundarea cunostintelor de dinamica a vortexurilor in acest tip de materiale prin alte tipuri de masuratori si analize.

Realizat: Raportul de cercetare prezinta date experimentale noi, privind cresterea prin PLD a heterostructurilor de tip supraconductor/izolator/supraconductor de foarte buna calitate. S-a evidentiat faptul ca stratul izolator de STO, cu grosime de zeci de nm, nu impiedeaza asupra calitatii stratului supraconductor crescut ulterior. In plus, masuratori de magnetizare, susceptibilitate multiarmonica si transport electric in campuri magnetice cu diverse orientari au evidentiat o crestere a densitatii critice de curent, o valoare mare a potentialului mediu de fixare a vortexurilor si o

anizotropie scazuta a curentului critic intr-o plaja larga a campului magnetic. Aceste imbunatatiri se datoreaza centrilor sinergetici de fixare, obtinuti prin decorarea substratului cu nano-insule de argint, prin auto-asamblarea nanofirelor de BZO in matricea de YBCO, si la interfetele supraconductor izolator. La anumite valori ale campului magnetic s-a observat o despicare a peak-ului in dependenta densitatii critice de curent de unghiul dintre campul magnetic si heterostructura, care a fost explicat prin segmentarea in forma de scara a vortexurilor inclinate aproape paralel cu planul stratului, pentru a-si minimiza energia fixandu-se pe segmentele de defecte din planele *a-b* induse la interfete. Concluziile sunt sustinute calitativ si de imagini de microscopie electronica in transmisie.



- Faza: **Multistructuri transparente formate din semiconductori degenerati si materiale cu potential ferroelectric.** Obiectiv: Investigarea heterostructurilor transparente obtinute prin depunere cu ajutorul laserului pulsant formate din electrozi transparenti (semiconductori cu banda larga degenerati – Al:ZnO) si un strat dielectric/feroelectric (Li:ZnO), structuri depuse pe substraturi monocristaline transparente (ZnO, SrTiO₃). Multistructurile vor fi investigate structural (XRD), optic (SE) si electric (caracteristici curent-tensiune (IV), masuratori de histerezis si capacitate). Studiul unor astfel de structuri reprezinta o baza de cunoastere pentru realizarea ulterioara a unor dispozitive transparente de tip tranzistor cu efect de camp si cu proprietati feroelectrice. Toate activitatile propuse in aceasta faza de nucleu au fost derulate, iar obiectivul fazei a fost atins

Realizat: Caracterul feroelectric al filmelor de LZO ramane inca discutabil, intrucat in ciuda dovezilor oferite de masuratorile de capacitate care prezinta o forma caracteristica feroelectricilor, nu a putut fi masurat un ciclu de histerezis in polarizare sau curent. Proiectul ar putea continua prin elaborarea si investigarea structurilor de tip Metal-Feroelectric-Semiconductor.

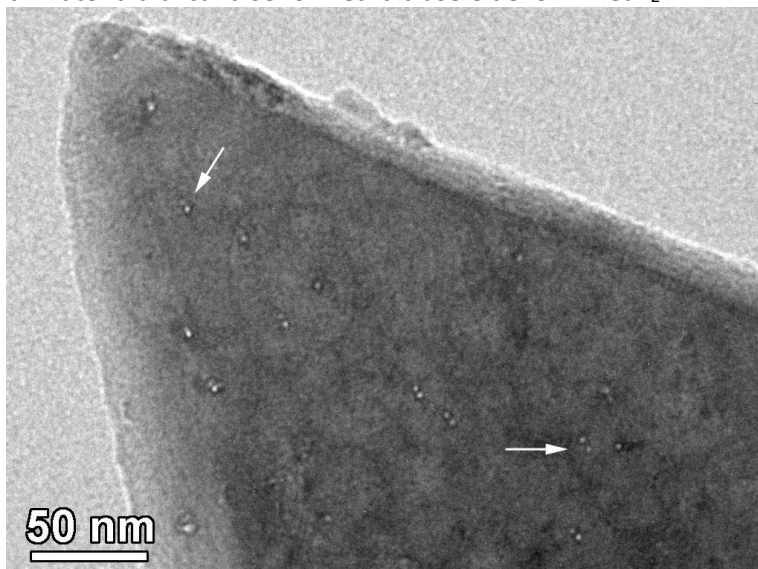
- Faza: **Structura si magnetism in ferrite nanocristaline.** Obiective: faza consta intr-un studiu aprofundat al unei categorii de sisteme tip nanoparticule intens studiate din perspectiva abordarii legaturilor dintre proprietatile magnetice, chimice si de structura, si anume ferritele nanocristaline. In acest sens, se are in vedere evidentierea influentei diverselor substitutii cationice asupra ocuparii pozitiiilor cristaline si asupra proprietatilor magnetice. De asemenea, de interes este si studierea influentei procedurii de preparare asupra unor ceramici vitroase bazate pe magnetita obtinute prin cristalizarea topiturilor borosilicate care contin Fe, din privinta tipului de agent de nucleatie. Este propusa o caracterizare complexa prin difractie de raze X, microscopie electronica de transmisie si de baleiaj, magnetometrie cu proba vibranta si spectroscopie Mössbauer.

Realizat: Obiectivul fazei a fost realizat in totalitate prin publicarea articolului "Effect of P₂O₅ on the Structural and Magnetic Properties of Magnetite-Based Glass-Ceramics", de catre Viorel Sandu, Simona Greculeasa, Andrei Kuncser, si Victor Kuncser, in Journal of the American Ceramic Society, (J. Am. Ceram. Soc., 1–9 (2016), DOI: 10.1111/jace.14457), cotat ISI cu factorul de impact 2.787 si factorul de influenta 0.663 (apps.webofknowledge.com).

- Faza: **Proprietati si transformari morfostructurale in materiale de interes pentru domeniul nuclear.** Obiective: aplicarea de tehnici avansate de microscopie electronica de inalta rezolutie pentru caracterizarea defectelor induse prin iradierea cu particule de energii inalte in materiale de interes pentru aplicatii in domeniul nuclear si aerospacial. Aceste studii se vor derula in cadrul unor proiecte selectate pe

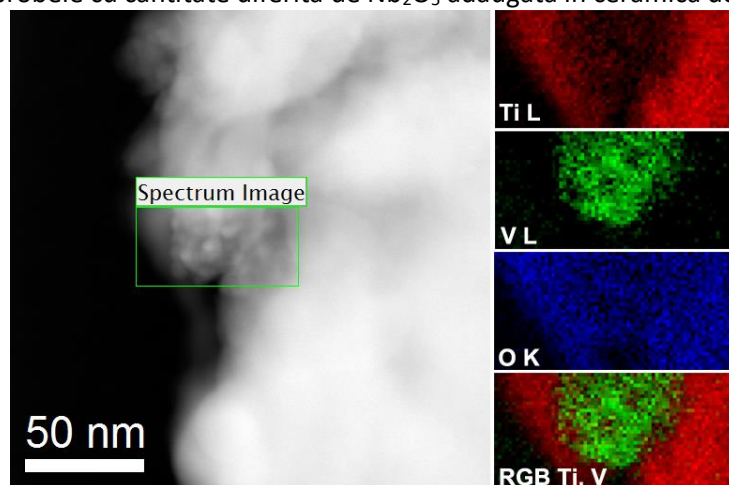
baza de competitie in cadrul consorțiului CERIC. Activitățile propuse in aceasta faza de nucleu au fost derulate in totalitate, iar obiectivul fazei a fost atins.

Realizat: Observațiile de microscopie electronica au demonstrat ca formarea traselor de ioni in CaF_2 pentru valori ale puterii de stopare electronice mai mici de 3 keV/nm are loc doar in prezenta topirii. Trasele de ioni observate prin TEM dupa iradiere la aceeasi putere de stopare mica indica faptul ca interpretarea curenta a formării traselor de ioni printr-un mecanism de spike termic este inadecvata si ca este necesara studiarea unui alt posibil mecanism. Datele obtinute prin TEM demonstreaza in mod convingator ca evaluarea dimensiunii traselor de ioni se poate realiza folosind aceasta tehnica in conditii speciale ale imaginii. Determinările STEM-EELS au dovedit ca fluorul ramane in interiorul materialului cand se formeaza trasele de ioni in CaF_2 .



- Faza: **Investigarea structurala si a starilor de valenta ale vanadiului in PZT dopat cu vanadiu si niobiu prin metodele TEM-EELS si RES.** **Obiectiv:** Determinarea starii de valenta si a localizării ionilor de vanadiu in ceramicile de PZT dublu dopate cu Nb si V. Studiile au fost efectuate in cadrul proiectului CERIC nr. 20152049 cu titlul: "Investigation of vanadium valence state in vanadium doped PZT by TEM-EELS, EPR and XANES/XAFS", aprobat in urma competitiei din luna martie 2015 (Call 2).

Realizat: Studiile TEM pe probele **PZT:1%V+1%Nb (1)**, **PZT:1%V+2%Nb (4bis)** si **PZT:2%V (5)** au aratat prezenta unor faze secundare asociate vanadiului. Imagistica spectrala EELS-SI a evidentiat o segregare a oxidului de vanadiu intr-o matrice ce contine oxid de titan. Din studiile EELS au fost identificate starile de oxidare ale vanadiului ca fiind +4 in proba **PZT:1%V+1%Nb (1)**, +3 in proba **PZT:1%V+2%Nb (4bis)** si +5 in proba **PZT:2%V (5)**. Studiile RES au identificat prezenta ionilor V^{4+} izolati in rețeaua cristalina a PZT in cele trei probe co-dopate cu V si Nb. In proba **PZT:2%V (5)** exista ioni V^{4+} in faza cristalizata secundara PbV_2O_6 . Rezultatele obtinute indica faptul ca valenta si distributia ionilor de vanadiu este diferita in probele cu cantitate diferita de Nb_2O_5 adaugata in ceramica de PZT.



- Faza: **Heterostructuri organice obtinute prin evaporare termica in vid pe substrat flexibil.** **Obiectiv:** realizarea de heterostructuri cu unul sau mai multe straturi pe baza de compusi organici mic molecularari pe

substrat flexibil de IZO (In:ZnO) si investigarea proprietatilor structurale, optice si electrice ale acestora. De asemenea se are in vedere un studiu comparativ cu alte structuri obtinute pe substrat de ITO.

Realizat: Au fost atinse obiectivele propuse si se pot trage urmatoarele concluzii: 1. Prin PLD se pot obtine straturi IZO de calitate ridicata chiar si pe substrat flexibil, caracterizate de o transparenta ridicata si o rezistivitate scazuta. 2. Heterostructurile organice realizate pe suport de IZO prezinta un curent mult mai bun daca IZO a fost tratat anterior in plasma. 3. Adaugarea unui strat suplimentar de Alq3 la structura cu doua straturi organice CuPc/PTCDA realizata pe IZO-UN duce de asemenea la o crestere a curentului. 4. IZO poate inlocui cu succes ITO atat in OPV-uri cat si in OLED-uri intrucat au proprietati asemenatoare si heterostructurile realizate cu doua straturi organice atat pe ITO cat si pe IZO prezinta valori apropiate ale curentului. 5. Pe structura cu IZO-UN a fost pusa in evidenta aparitia efectului fotovoltaic.

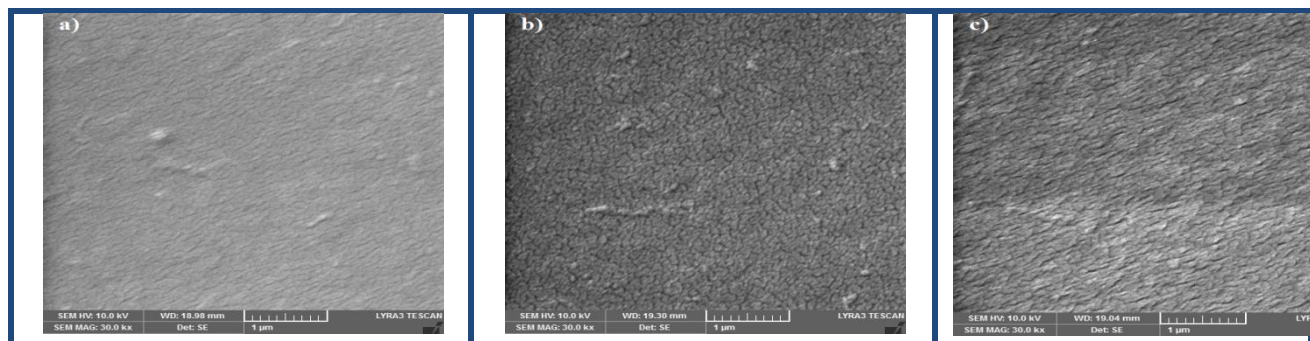
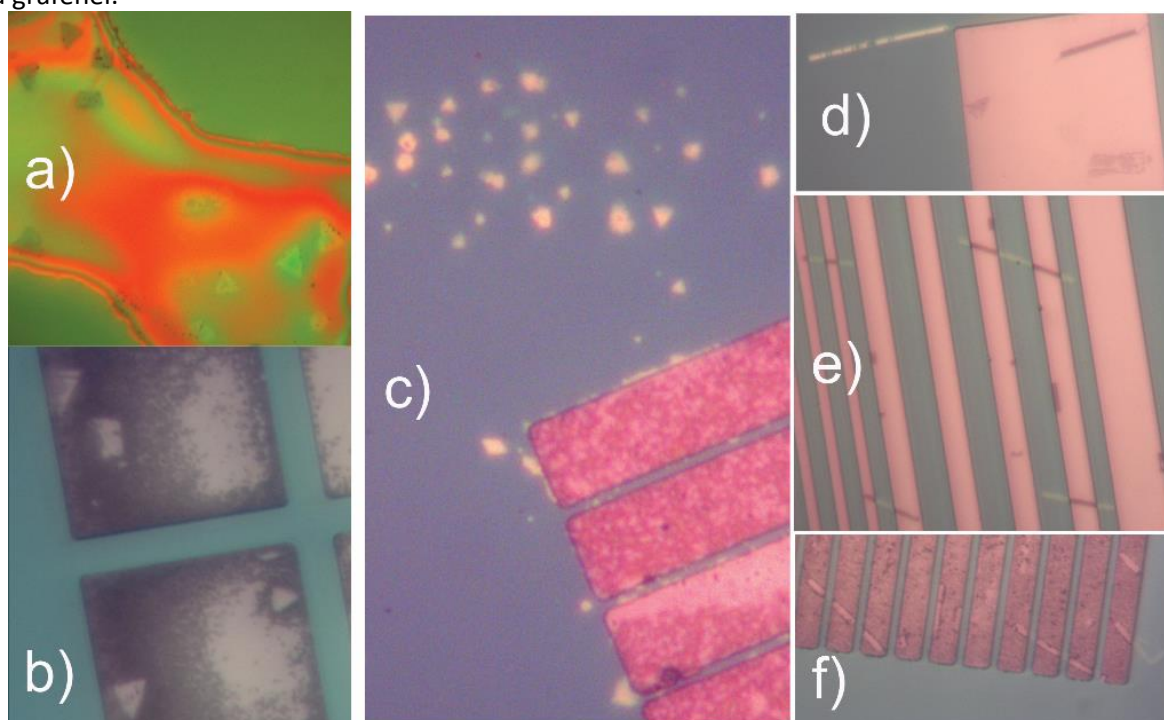


Figura 2: Imaginile SEM a straturilor: IZO-UN, IZO-TA si IZO-OP.

- Faza: **Corelarea parametrilor de crestere cu morfologia si proprietatile optice la cristale 2D-TMD.**

Obiectiv: Realizarea de materiale 2D - MoS₂ ; Cracterizari de morfologie si proproetati optice

Realizat: In aceasta faza s-a putut demonstra ca folosind metoda de depuneri PVD de straturi de grosimi atomice de MoS₂ s-au obtinut cresteri pe suporti de SiO₂/Si cu nucleere preferentiala la marginea ferestrelor in SiO₂ si la fulgi de grafena. Rezultatele au o importanta deosebita pentru aplicatii practice si de studiu. In principal s-a urmarit dependenta cresterii de 2D-MoS₂ functie de temperatura si timpul de depunere. Acoperiri 2D-MoS₂ de largime de peste 50 µm au fost obtinute prin nucleere la marginea ferestrelor in SiO₂. Straturile au fost investigate prin masurari Raman, fotoluminescenta, microscopie optica si SEM pentru determinari de structura si calitate cristalina. S-a demonstrat de asemenea formarea de heterojonctiuni 2D-MoS₂ cu grafena si cresterea de nanofire (nanotuburi) pe suprafata grafenei.

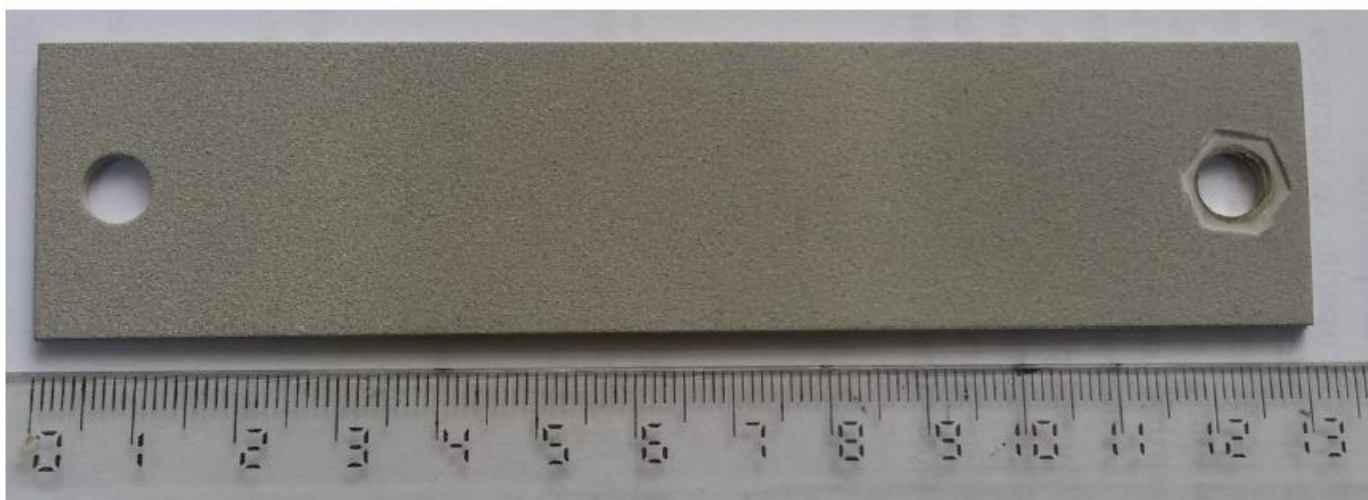


- Faza: **Aliaje nanocompozite magnetice cu faze $L1_0$ cuplate prin schimb.** Obiectiv: elaborarea si caracterizarea unor aliaje nanocompozite magnetice pe baza de precursori binari FePt si CoPt, aliaje ce contin faze de interes magnetic $L1_0$, cuplate prin intermediul interactiunii de schimb.

Realizat : In urma rezultatelor obtinute si prezentate in raportul de faza, apreciem faptul ca obiectivele propuse au fost atinse in totalitate. S-a aratat in doua sisteme de magneti permanenti fara pamanturi rare, posibilitatea co-existentei de faze magnetice dure si moi, faze care sunt complet cuplate prin schimb, astfel incat se deschid perspectivele optimizarii materialului prin rafinarea ulterioara a microstructurii obtinute, realizarea unui cuplaj magnetic la scara nanometrica si optimizarea raspunsului magnetic respectiv obtinerea unui produs energetic maxim $(BH)_{max}$ la o valoare compatibila cu sistemul FePt, fapt ce ar permite considerarea acestor sisteme ca precursori pentru viitoarea clasa de magneti permanenti fara pamanturi rare, cu aplicatii in cele mai diverse tehnologii emergente.

- Faza: **Optimizarea parametrilor de depunere in jet de plasma a pulberilor ceramice pe baza de zirconie pentru acoperiri cu rol de bariera termica pentru aplicatii Aerospatale si caracterizarea microstructurala complexa a straturilor obtinute.** Obiectiv: evidentierea structurii de micro-pori in ceramica de zirconia depusa prin APS, corelarea acesteia cu densitate efectiva si investigarea posibilitatii modificarii acesteia prin modificarea parametrilor de depunere APS, in special modificând distanta dintre substrat si capul de depunere prin jet de plasma.

Realizat: In cadrul fazei de proiect s-au realizat depuneri de ceramica YSZ pe epruvete in care s-a modificat distanta de depunere dintre substrat si capul plasmatron in intervalul 80-130 mm. Din tomogramele de raze X pe esantionul corespunzand distantei de 80 mm si 130 mm rezulta ca densitatea efectiva, respectiv porozitatea probelor, difera cu (+/-) 4% fata de probele etalon de zirconie. A doua tehnica de tomografie TEM a fost de curand implementata in INCD Fizica Materialelor si arata posibilitatea reconstructiei volumului unor esantioane de proba la nivel nanometric. Urmeaza ca odata cu perfectionarea utilizarii sistemului de catre operatori, prin cresterea rezolutiei spatiale sa se reuseasca evidentierea de fisuri si limite de graunti la nivel nanometric.



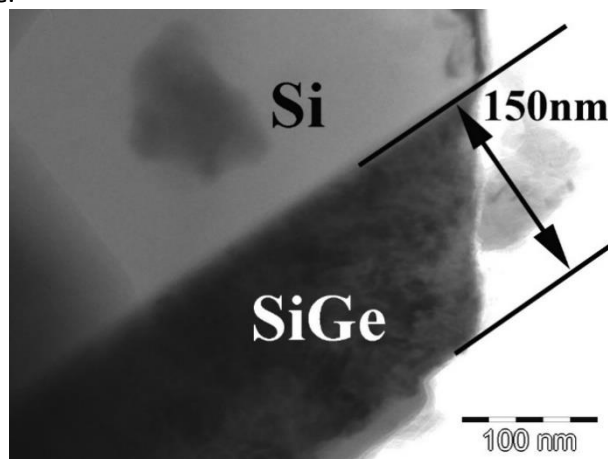
- Faza: **Magnetism si interactii in sisteme de nanoentitati magnetice pentru aplicatii bio-medicale.** Obiectiv: Studii complexe pe ferrofluide magnetice (pe baza nanoparticule superparamagnetice monodomeniu de oxid de fier), cu diverse fractii volumice, cu aplicatii directe in hipertermia magnetica prin evaluarea unitara a tuturor parametrilor morfo-structurali si magnetici ce pot influenta rata specifica de absorbtie (SAR), precum si prin determinarea dependentei acestora de fractia volumica.

Realizat: Obiectivul fazei, constand in studiul unor sisteme de ferrofluide magnetice cu posibile aplicatii in hipertermia magnetica fost atins in intregime. Cu scopul de-a analiza influenta fractiei volumice asupra raspunsului SPM al unui ferofluid, au fost investigate diverse FF cu fractii volumice cuprinse in intervalul (0.005-0.16). Modul in care interactiile magnetice inter-particula afecteaza comportamentul SPM al sistemelor de nanoparticule joaca un rol important in optimizarea hipertermiei magnetice. Nanoparticulele magnetice pot suferi aglomerari in interiorul tesutului tumoral ce au ca rezultat aparitia interactiunilor magnetice mutuale intre nanoparticule. Efectul acestor interactiuni consta fie intr-o imbunatatire a raspunsului sistemului de nanoparticule la excitatia magnetica alternativa, fie intr-o diminuare a acestuia. Din acest punct de vedere, este important de cunoscut dependenta acestor efecte de gradul de aglomerare(sau de fractia volumica din tesut). S-a evaluat cantitativ, in raport cu fractia volumica, influenta pe care

interactiunile magnetice dipolare ce se manifesta in ferofluide o au asupra timpilor caracteristici de relaxare. S-au inregistrat curbe de temperatura, care ulterior au fost corectate prin aplicarea unor metodologii originale, obtinandu-se profilele adiabatic de incalzire. Utilizand modelul teoretic de evaluare a puterii disipate de un ferofluid supus excitarii magnetice alternative, in care s-a tinut cont de variatia KV cu fractia volumica si de parametrii fizici ai nanoparticulelor (determinati experimental) s-au generat curbele adiabatic teoretice de incalzire care sa fiteze cat mai bine curbele adiabatic experimentale. S-a observat ca datele experimentale pot fi fitate cu modelul SPM (in care s-a tinut cont de variatia KV cu fractia volumica si de parametrii fizici ai nanoparticulelor determinati experimental) doar daca constanta de timp de relaxare este modificata. Conform rezultatelor obtinute, aceasta prezenta o tendinta de micorare odata cu cresterea fractiei volumice, implicit a intensitatii interactiilor dipolare.

- Faza: **Studiul morfologiei si a proprietatilor optice ale straturilor subtiri pe baza de Si-Ge-Sn nanostructurat in matrice dielectrica.** Obiective: realizarea unor straturi subtiri formate din nanocristale (NC) din sistemul Si-Ge-Sn cu compozitii diferite, sa studiem morfologia straturilor si proprietatile optice ale acestora.

Realizat: In cadrul prezentei faze, am realizat integral obiectivele pe care ni le-am propus, si anume acelea de a realiza straturi subtiri formate din NC din sistemul Si-Ge-Sn cu compozitii diferite, de a studia morfologia straturilor si proprietatile optice ale acestora. Ne-am ocupat de sistemele binare GeSi si GeSn. Prepararea probelor s-a facut prin pulverizare cu magnetron si tratament termic, iar masurarile de caracterizare au cuprins o gama larga de metode de la microscopia electronica, XRD, spectroscopia Raman, pana la masurari de caracteristici electrice si fotoelectrice si masurari de transmisie si reflexie.



- Faza: **Sinteza si proprietatile optice ale oxidului de grafena redus functionalizat cu poli para fenilen vinilen.** Obiectiv : evidentierea proprietatile optice ale compozitelor bazate pe oxid de grafena (RGO) in stare redusa functionalizat cu poli para fenilen vinilen (PPV), sintetizat pe cale chimica si electrochimica.

Realizat: Obiectivele acestei faze au fost realizate in proportie de 100%, o speciala atente fiind acordata influentei RGO asupra proprietatilor optice ale PPV in stare dopata si nedopata. Folosind metoda SERS, spectroscopia FTIR in geometrie de reflexie in unghi razant si studiile de fotoluminescenta, au fost demonstrate urmatoarele: i) conversia termice a solutiei de precursorului de PPV cu diferite concentratii de RGO conduce la obtinerea de compozite de tip PPV nedopat/RGO, fapt evidentiat prin studii SERS si spectroscopie FTIR in geometrie de reflexie in unghi razant; masuratorile de fotoluminescenta polarizata au indicat ca unghiul de legare (θ_{PL}), variaza de la 12° la 31° , cand concentratiei de RGO creste de la 0 la 0.5 %. interactii $\pi-\pi^*$ intre ciclurile benzenice ale PPV in stare nedopata si foile de RGO sunt invocate a fi implicate;; ii) utilizand spectroscopia FTIR a fost raportata prezenta a doi produse de reactie, PPV dopat si DSB, obtinuti prin polimerizarea electrochimica a TBPX pe suprafata electrodului de aur, cand voltametria ciclica a fost oprita la potentialul de + 2V fata de electrodul de referinta Ag/AgCl; iii) utilizand studii corelate despectroscopia IR si de PL au fost raportate urmatoarele schimbari pe masura cresterii concentratiei de RGO in solutia polimerizarii electrochimice: a) scaderea cantitatii de DSB in favoarea PPV in stare dopata; acest fapt a fost argumentat prin cresterea absorbantei benzii de IR avand maxim la 1417 cm^{-1} , atribuita modului vibrational de indoire in plan a legaturii C=C aferenta ciclului benzenic, in cazul compozitelor pe baza de PPV dopat si 0.5 % RGO, sintetizat electrochimic, dupa interactia cu solutia de NH_4OH (1M). Cresterea absorbantei benzii IR de la 1417 cm^{-1} indica un efect de impiedicare sterica indus prin functionalizarea covalenta a RGO cu PPV. Conform masuratorile de PL in lumina polarizata, valorile unghiului de legare (θ_{PL}) a PPV pe suprafata RGO variaza de la 28° la 34° , o data cu cresterea concentratiei de RGO de la 0 la 0.5 % (procente de masa); iv) au fost raportate valori diferite ale unghiului de orientare

a momentului dipolar de tranzitie pentru benzile IR situate la 833, 964, 1415 si 1514 cm^{-1} , in cazul compozitelor de tip RGO functionalizat necovalent cu PPV nedopat, respectiv compozitele pe baza de RGO functionalizat covalent cu PPV dopat (avand aceeasi concentratie de RGO) depuse pe suporti de aur; v) un efectul de stingere a PL PPV a fost raportat experimental a avea loc in prezenta RGO.

- Faza : **Studiul difuziei cuprului in straturi subtiri calcogenice sub influenta luminii.** Obiectiv: Depunerea de straturi subtiri calcogenice prin metoda PLD, de doua grosimi diferite. Studiul proprietatilor optice pentru aceste starturi.

Realizat: Ca o dificultate majora a aparut exfolierea structurii bistrat $\text{Cu-As}_2\text{S}_3$, fenomen neasteptat pe baza experientelor noastre anterioare cu structuri bistrat $\text{Ag-As}_2\text{S}_3$. S-a reusit obtinerea unei structuri $\text{Cu-As}_2\text{S}_3$ care prezinta o stabilitate la exfoliere de la realizare. Studiul preliminar de spectroscopie dielectrica arata o modificare radicala a comportamentului structurii $\text{Cu-As}_2\text{S}_3\text{-Cu}$ la aplicarea unei tensiuni de polarizare. Propunem continuarea studiului si in aceasta directie.

Obiectiv 3- Dezvoltari aplicative ale materialelor si structurilor functionale cu impact tehnologic, cu urmatoarele componente:

- Elaborarea de modele functionale la nivel de laborator (senzori, dispozitive electronice si optoelectronice)
- Elaborarea de aparatura de sinteza si caracterizare, precum si optimizarea metodelor de investigare la scara micro si nanometrica utilizand aparatura existenta

Acest obiectiv este realizat prin fazele aferente proiectului 3 **Materiale functionale si structuri cu impact tehnologic; noi dispozitive si metode de sinteza si de analiza.**

In ceea ce priveste realizarea unui modelul experimental al instalatiei de tratament termic rapid pentru straturi subtiri ITTRSS-01, se poate spune ca obiectivul a fost atins. A fost realizat un demonstrator de instalatie pentru tratament termic rapid pentru straturi subtiri, impreuna cu documentatia aferenta. Echipamentul este functional in cadrul Laboratorului de chimie al grupului de heterostructuri si materiale oxidice din cadrul laboratorului de materiale si structuri multifunctionale. Studiul de executie si documentatia aferenta fac parte din cele 11 studii si documentatii pentru echipamente noi asumate in programul Nucleu al INCDFM. Echipamentul este unul din cele 5 prevazute a fi realizate in cadrul proiectului.

In ceea ce priveste al doilea obiectiv de realizare a unei instalatii XPS, a fost proiectată și realizată în cadrul INCDFM o nouă instalație XPS funcțională, cu prețuri mult mai mici decât cele cerute de producătorii tradiționali de astfel de echipamente și cu posibilitatea realizării de echipamente similare pentru beneficiari externi instituției gazdă.

S-au evidenciat structuri de micro-pori in ceramica de zirconie depusa prin APS, corelarea acesteia cu densitate efectiva si investigarea posibilității modificării acesteia prin modificarea parametrilor de depunere APS, in special modificând distanta dintre substrat si capul de depunere prin jet de plasma a fost atins prin implementarea a doua tehnici de tomografie, tomografie de raze X si tomografie de microscopie electronica prin transmisie (TEM).

S-au realizat depuneri de ceramica YSZ pe epruvete in care s-a modificat distanta de depunere dintre substrat si capul plasmatron in intervalul 80-130 mm. Din tomogramele de raze X pe esantionul corespunzand distantei de 80 mm si 130 mm rezulta ca densitatea efectiva, respectiv porozitatea probelor, difera cu (+/-) 4% fata de probele etalon de zirconie. A doua tehnica de tomografie TEM a fost de curand implementata in INCD Fizica Materialelor si arata posibilitatea reconstructiei volumului unor esantioane de proba la nivel nanometric. Urmeaza ca odata cu perfectionarea utilizarii sistemului de catre operatori, prin cresterea rezolutiei spatiale sa se reuseasca evidentiarea de fisuri si limite de graunti la nivel nanometric.

Au fost realizati tranzistori in doua tipuri de configuratii, si anume cu electrozi de sursa-drena de ITO interdigitat si de aluminiu. Configuratia cu electrozi de aluminiu s-a dovedit a fi mai stabila. Parametrii electrici masurati pe tranzistorul obtinut, avand ca strat emisiv compusul organometalic de AlQ_3 dispersat in PMMA, prezinta caracteristici de transport in configuratie p-channel/emitter/n-channel de tip triplustrat. Totusi, pentru viitor, ne-am propus controlul grosimii optime a dielectricului de poarta prin utilizarea polimerului PMMA cu mase moleculare diferite si de grosimi diferite prin controlul vitezei de centrifugare la depunerea filmului de PMMA.

Au fost sintetizate cu succes, pentru prima data, atat filme uniforme si monofazice de hidroxiapatita cat si filme de biosticla, prin sinteza fizico-chimica asistata de plasma magnetron. Raspunsul functional mecanic si biologic a fost probat prin teste realizate in acord cu standardele ISO care reglementeaza acoperirile implantologice (ISO 13779-2:2008, ISO 10993-5:2009).

Fezabilitatea procedurii inovative de sinteza a acoperilor implant a fost demonstrata experimental. Astfel, datorita avantajelor introduse de costul de productie mai redus al tehnologiei in cauza comparativ cu cel al procedurilor de

acoperire consacrate, se deschid noi perspective de continuarea a cercetarilor pentru verificarea limitelor tehnologice ale noii tehnici de depunere.

In ceea ce priveste tehnica de difractie de electroni lenti, pornind de la o distributie de momente ale dipolilor localizati ce imita o proba feroelectrică de grosime d , am derivat un potential produs in vid de aceasta distributie și calculat traiectoriile electronilor reflectati de o astfel de suprafata. Aceste traiectorii au fost parametrizate astfel incat să putem deriva dependenta pozitiilor spoturilor LEED în functie de energia cinetica a electronilor, folosind un parametru legat de potentialul la suprafata, care poate fi exprimat ca $-ePd/(2\epsilon_0)$. Fitarea pozitiilor spoturilor LEED în functie de energiile cinetice electronice, cu polarizarea probei stiuta, permite derivarea parametrului d , care este neobisnuit de mic (sub 1 Å) pentru un caz practic analizat, cel al feroelectricului PZT(001). Dacă acest parametru d este interpretat ca fiind depolarizarea în interiorul feroelectricului (δ), atunci valorile obisnuite obtinute pentru curbură de benzi la suprafata în interiorul feroelectricului ar putea fi acomodate de această valoare scăzută a lui d folosind o valoare mai mică (cu un factor de 10 – 50 pentru PZT) a constantei dielectrice.

In cazul masurării straturilor feroelectrice de BTS in camp de frecvente ultrainalte, au fost dezvoltate doua metode de caracterizare dielectrica a straturilor feroelectrice din titanat de bariu și strontiu (BST) in microunde și unde milimetrice. Au fost investigate la frecvente foarte inalte straturi din BST cu un continut de 40% strontiu. Parametrii dielectrice obtinuti prin SPDR pot fi utilizati ca parametri de fitare in modelul electromagnetic al liniei CPW; prin combinarea celor doua metode se extrag cu precizie parametrii dielectrice ai filmelor feroelectrice in domeniu larg de frecventa.

Conversia energiei solare in substante chimice combustibile prin descompunerea fotoelectrochimica a apei, s-a realizat cu dispozitive simple și integrate folosite in conversia energiei solare in hidrogen, și au fost expuse principiile lor de functionare precum și modul de calcul al randamentului acestor dispozitive.

Alaturi de studiul de literatura, a fost realizat un studiu experimental in care au fost preparate filme de FeOOH (hidroxioxid de fer) și α -Fe₂O₃ (hematita) atat pe cale electrochimica cat și prin spin-coating iar caracteristicile morfologice și structurale ale acestora au fost studiate. Filmul de hematita obtinut electrochimic a fost caracterizat intr-o celula electrochimica in prezenta și-n absenta luminii. Un fotocurent de 42μA/cm² a fost observat la potential de 0.8V/Ag-AgCl, atunci cand electrodul de hematita a fost iluminat cu un simulator solar in conditii standard.

S-a obtinut in premiera ortoferita de lantan prin Spark Plasma Sintering, o metoda neconventionala de sinteza și sinterizare care prezinta avantajul unei procesari extrem de rapide a materialului și asigura o densificare ridicata a acestuia, apropiata de densitatea teoretica. Investigatiile realizate pe proba obtinuta confirma formarea LaFeO₃ in faza unica cu dimensiuni de particule de ordinul zecilor de nm. Datorita conditiilor de sinterizare care presupun o actiune concomitenta atat a presiunii cat și a pulsurilor de curent electric, in material s-au format clusteri cu dimensiuni de 1-2 μm, acestia avand o influenta consistenta asupra proprietatilor magnetice investigate pana in acest stadiu al proiectului. De asemenea s-a observat ca magnetizarea nu se satureaza, acest efect fiind o consecinta a distributiilor de interactii magnetice generate de formarea clusterilor cu dimensiuni diferite. Spectroscopia Mössbauer confirma existenta in structura nou formata a ionilor de Fe in starea de spin inalt, valorile ceva mai mici ale parametrilor hiperfini datorandu-se scurtarii legaturilor metal-oxigen ca urmare a compactizării generate de presiunea ridicata aplicata pe proba in timpul procesării. Temperatura de tranzitie magnetica este de 750 K in concordanta cu cele raportate pe acest material procesat diferit. In continuarea proiectului se vor realiza investigari ale proprietatilor feroelectrice și/sau catalitice cu elucidarea mecanismelor asociate.

Au fost realizate prin sinterizare asistata de camp electric compozite metalo ceramice cu 2 sau 3 straturi utilizand metale refractare (W), oxizi (Al₂O₃) și carburi (SiC). Au fost analizate proprietatile structurale, morfologice și termice (pana la 1000 C) ale acestor materiale. Utilizarea unui strat de aderenta intre W și Al₂O₃ dintr-un metal moale (V) permite obtinerea unor proprietati imbunatatite din punctul de vedere al aderenței și transferului de caldura. Solutia tehnologica propusa permite realizarea unor acoperiri groase (de ordinul 0.1-2 mm) a metalelor refractare asigurand protectia la coroziune și socuri termice.

Indicatori specifici pentru monitorizare și evaluare (valori minime asumate):

- Studii și documentatii pentru noi echipamente și metode: 11

4 studii și modelari de metoda sau material (fazele 2, 9, 10, din proiectul 1; faza 19 din proiectul 2); 2 dispozitive (fazele 1 și 4 din proiectul 3); 1 dezvoltare de metoda (faza 2 din proiectul 3); 5 studii/documentatii pentru metode de sinteza materiale/structuri cu potential aplicativ (fazele 3, 5, 6, 9 și 10 din proiectul 3)

Grad de indeplinire: 100 %

- Produse și tehnologii (la nivel de material sau demonstrator produs in laborator): 30

20 materiale sau heterostructuri cu potential aplicativ sintetizate in laborator (fazele 1, 4, 5, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 14, 15, 16, 17, 19, 20 din proiectul 2; fazele 6, 7, 8, 9, 10 din proiectul 3)

Grad de indeplinire: 60 %

- Lucrari publicate in jurnale ISI: 130

72 lucrari publicate deja in jurnale ISI (existente de Web of Science), **16** lucrari publicate on-line, acceptate sau submise

Grad de indeplinire: 55 % (numai cu lucrarile publicate)

- Cereri de brevet depuse: 25

5 cereri depuse si inca **2** pregatite pentru a fi depuse

Grad de indeplinire: 20 % (numai cu cererile depuse).

- Aplicatii de proiecte: 40 (depinde si de ritmicitatea competitiiilor aferente PN3), dintre care 5 aplicatii Orizont 2020

92 de proiecte depuse la competitiiile organizate in 2016 in calitate de coordonator si alte 24 in calitate de partener (40 de proiecte tip PED, din care 7 au sanse de finantare; 27 proiecte tip PCE din care 22 au trecut de prima etapa de evaluare; 2+5 proiecte tip PCCF; 5 proiecte tip PTE, din care unul acceptat pentru finantare; 11 propuneri la ROSA; 2 propuneri la IFA-CEA, ambele acceptate pentru finantare; 3 propuneri la ELI-NP, unul acceptat pentru finantare; 1 propunere la FAIR, acceptata pentru finantare; 1 propunere EURATOM, acceptata pentru finantare). La acestea se adauga si **1** propunere de tip Teaming in cadrul Horizon 2020.

Grad de indeplinire: 100 %

- Tineri cercetatori angajati in institut: 10

5 tineri angajati in 2016.

Grad de indeplinire: 50 %

- Firme contactate pentru valorificarea rezultatelor: 20 (domenii: electronica; auto; IT; securitate; energetica; echipamente si automatizari; medicina; protectia mediului)

12 firme contactate (Continental, Honeywell, Optoelectronica, Plasma Jet, Nuclear & Vacuum, Sara Pharm, Process Innovation Nucleus SRL, Sanimed, Apel Laser, IMA METAV, R&D Consultanta si Servicii SRL, Internet SRL)

Grad de indeplinire: 60 %.

Dupa cum se poate observa gradul de indeplinire al indicatorilor este, in general, mai mare de 50 %, ceea ce denota faptul ca programul a produs rezultatele asteptate. In ceea ce priveste brevetele, este de asteptat ca numarul cererilor de patente sa creasca semnificativ in anul 2017, avand in vedere faptul ca in acest an au fost desfasurate in multe cazuri activitati de validare a solutiei tehnice, urmand ca anul urmator sa fie finalizate si cererile de brevet.

4. Prezentarea rezultatelor:

4.1. Stadiul de implementare al proiectelor componente

Denumirea proiectului	Tipul rezultatului estimat	Stadiul realizării proiectului
1. Fenomene si procese fizico-chimice in sisteme nanometrice complexe, suprafete si interfete.	Studii, lucrari stiintifice	3 studii; 23 de lucrari publicate
2. Sinteza si caracterizarea materialelor nanostructurate, straturilor subtiri si heterostructurilor	Studii, produse/tehnologii (in special materiale), lucrari stiintifice, brevete de inventie	1 studiu, 20 de materiale sau heterostructuri preparate (rapoartele de faza includ detalii despre formularea chimica si procedura de preparare), 36 de lucrari publicate, 3 cereri de brevet de inventie
3. Materiale functionale si structuri cu impact tehnologic; noi dispozitive si metode de sinteza si de analiza.	Dispozitive/echipamente, studii sau documentatii, metode, lucrari	2 echipamente cu documentatia aferenta, 1 metoda noua, 5 metode/retete/documentatii pentru preparat materiale, 2 cereri de brevet de inventie depuse si 2 in pregatire, 12 lucrari publicate

4.2. Documentații, studii, lucrări, planuri, scheme și altele asemenea:

Tip	Nr. ... realizat in 2016
Documentații/retete/metode	8
Studii	4
Lucrări	71
Planuri	-
Scheme pt. echipamente	2
Altele asemenea (<i>se vor specifica</i>)-materiale, heterostructuri, demonstratori	20

Din care:

4.2.1. Lucrări științifice publicate în jurnale cu factor de impact relativ ne-nul (2016):

Nr .	Titlul articolului	Numele Jurnalului, Volumul, pagina nr.	Nume Autor	Anul publicării	Scorul relative de influență al articolului	Numărul de citări ISI
1	Fabrication of periodical surface structures by picosecond laser irradiation of carbon thin films: transformation of amorphous carbon in nanographite	APPLIED SURFACE SCIENCE, 390, 236 - 243	Popescu, C; Dorcioman, G; Bitu, B; Besleaga, C; Zgura, I; Himcinschi, C; Popescu, AC	2016	1.476	0
2	Optical evidence for chemical interaction of the polyaniline/fullerene composites with N-methyl-2-pyrrolidinone	JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE, 1125, 340 - 349	Baibarac, M; Baltog, I; Daescu, M; Lefrant, S; Chirita, P	2016	0.516	0
3	Be/W and W/Be bilayers deposited on Si substrates with hydrogenated Fe-Cr and Fe-Cr-Al interlayers for plasma facing components	JOURNAL OF NUCLEAR MATERIALS, 481, 73 - 80	Greculeasa, SG; Palade, P; Schinteie, G; Lungu, GA; Porosnicu, C; Jepu, I; Lungu, CP; Kuncser, V	2016	2.716	0

Nr .	Titlul articolului	Numele Jurnalului, Volumul, pagina nr.	Nume Autor	Anul publicării	<i>Scorul relative de influență al articolului</i>	Numărul de citări ISI
4	High performance FETs based on ZnO nanowires synthesized by low cost methods	NANOTECHNOLOGY, 27, 475303	Florica, C; Costas, A; Kuncser, A; Preda, N; Enculescu, I	2016	2.367	0
5	Novel multiferroic (Pb-1 (-) Nd-3x/2(x))(Ti-0.98 (-) yFeyMn0.02)O-3 ceramics with coexisting ferroelectricity and ferromagnetism at ambient temperature	MATERIALS & DESIGN, 110, 693 - 704	Craciun, F; Cernea, M; Fruth, V; Zaharescu, M; Atkinson, I; Stanica, N; Tanase, LC; Diamandescu, L; Iuga, A; Galassi, C	2016	2.065	0
6	Effects of vanadium doping on sintering conditions and functional properties of Nb-Li co-doped PZT ceramics. Comments on Li location	JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS, 685, 159 - 166	Amarande, L; Miclea, C; Cioangher, M; Grecu, MN; Pasuk, I	2016	2.607	0
7	Vapor transport growth of MoS2 nucleated on SiO2 patterns and graphene flakes	NANO RESEARCH, 9, 3504 - 3514	Stoica, T; Stoica, M; Duchamp, M; Tiedemann, A; Mantl, S; Grutzmacher, D; Buca, D; Kardynal, BE	2016	5.505	0
8	Dielectric and photoluminescence properties of Nd and Ga codoped-BaTiO3, prepared by sol-gel method	JOURNAL OF MATERIALS SCIENCE-MATERIALS IN ELECTRONICS, 27, 11371 - 11378	Cernea, M; Vasilescu, CA; Secu, M; Aldica, G; Surdu, A; Ganea, P	2016	0.603	0
9	Growth mechanisms and band bending in Cu and Pt on Ge(001) investigated by LEED and photoelectron spectroscopy	SURFACE SCIENCE, 653, 97 - 106	Tanase, LC; Bocirnea, AE; Serban, AB; Abramiuc, LE; Bucur, IC; Lungu, GA; Costescu, RM; Teodorescu, CM	2016	1.254	0
10	Titanium oxide - reduced graphene oxide - silver composite layers synthesized by laser technique: Wetting and electrical properties	CERAMICS INTERNATIONAL, 42, 16191 - 16197	Gyorgy, E; del Pino, AP; Datcu, A; Duta, L; Logofatu, C; Iordache, I; Duta, A	2016	3.000	0

Nr .	Titlul articolului	Numele Jurnalului, Volumul, pagina nr.	Nume Autor	Anul publicării	<i>Scorul relative de influență al articolului</i>	Numărul de citări ISI
11	Compositional dependence of optical properties of Sm ³⁺ -doped Y ₃ ScxAl _{5-x} O ₁₂ polycrystalline ceramics	JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS, 683, 547 - 553	Gheorghe, C; Lupei, A; Hau, S; Voicu, F; Gheorghe, L; Vlaicu, AM	2016	2.607	0
12	Nanostructured germanium deposited on heated substrates with enhanced photoelectric properties	BEILSTEIN JOURNAL OF NANOTECHNOLOGY, 7, 1492 - 1500	Stavarache, I; Maraloiu, VA; Prepelita, P; Iordache, G	2016	1.973	0
13	Formation of pure-phase W ₂ C nanoparticles through carbothermal reduction in the presence of Pd(0) nanoparticles	JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS, 682, 679 - 685	Mitran, RA; Radulescu, MC; Buhalteanu, L; Tanase, LC; Dumitrescu, DG; Matei, C	2016	2.607	1
14	Ferroelectric triggering of carbon monoxide adsorption on lead zirconate-titanate (001) surfaces	SCIENTIFIC REPORTS, 6, 35301	Tanase, LC; Apostol, NG; Abramiuc, LE; Tache, CA; Hrib, L; Trupina, L; Pintilie, L; Teodorescu, CM	2016	3.435	0
15	Direct and contactless electrical control of temperature of paper and textile foldable substrates using electrospun metallic-web transparent electrodes	SCIENTIFIC REPORTS, 6, 34584	Busuioc, C; Evangelidis, A; Galatanu, A; Enculescu, I	2016	3.435	0
16	Ground state spin and excitation energies in half-filled Lieb lattices	PHYSICAL REVIEW B, 94, 165103	Tolea, M; Nita, M	2016	2.885	0
17	Ultra-Thin Epitaxial Tungsten Carbide Schottky Contacts in 4H-SiC	IEEE ELECTRON DEVICE LETTERS, 37, 1318 - 1320	Knoll, L; Teodorescu, V; Minamisawa, RA	2016	2.180	0
18	Reactive spark plasma sintering of MgB ₂ in nitrogen atmosphere for the enhancement of the high-field critical current density	SUPERCONDUCTOR SCIENCE & TECHNOLOGY, 29, 105020	Badica, P; Burdusel, M; Popa, S; Pasuk, I; Ivan, I; Borodianska, H; Vasylykiv, O; Kuncser, A; Ionescu, AM; Miu, L; Aldica, G	2016	2.057	0

Nr .	Titlul articolului	Numele Jurnalului, Volumul, pagina nr.	Nume Autor	Anul publicării	Scorul relative de influență al articolului	Numărul de citări ISI
19	Superconductivity in MgB2 irradiated with energetic protons	PHYSICA C-SUPERCONDUCTIVITY AND ITS APPLICATIONS, 528, 27 - 34	Sandu, V; Craciun, L; Ionescu, AM; Aldica, G; Miu, L; Kuncser, A	2016	0.567	0
20	Combinatorial MAPLE deposition of antimicrobial orthopedic maps fabricated from chitosan and biomimetic apatite powders	INTERNATIONAL JOURNAL OF PHARMACEUTICS, 511, 505 - 515	Visan, A; Stan, GE; Ristoscu, C; Popescu-Pelin, G; Sopronyi, M; Besleaga, C; Luculescu, C; Chifiriuc, MC; Hussien, MD; Marsan, O; Kergourlay, E; Grossin, D; Brouillet, F; Mihailescu, IN	2016	1.338	0
21	Evaluation of the Antimicrobial Activity of Different Antibiotics Enhanced with Silver-Doped Hydroxyapatite Thin Films	MATERIALS, 9, 778	Predoi, D; Popa, CL; Chapon, P; Groza, A; Iconaru, SL	2016	1.713	0
22	Photocatalytic, Antimicrobial and Biocompatibility Features of Cotton Knit Coated with Fe-N-Doped Titanium Dioxide Nanoparticles	MATERIALS, 9, 789	Stan, MS; Nica, IC; Dinischiotu, A; Varzaru, E; Iordache, OG; Dumitrescu, I; Popa, M; Chifiriuc, MC; Pircalabioru, GG; Lazar, V; Bezirtzoglou, E; Feder, M; Diamandescu, L	2016	1.713	0
23	Vortex activation energy in the AC magnetic response of superconducting YBa2Cu3O7 thin films with complex pinning structures	SUPERCONDUCTOR SCIENCE & TECHNOLOGY, 29, 95013	Ivan, I; Ionescu, AM; Miu, D; Mele, P; Miu, L	2016	2.057	0
24	Magnetic Nanoparticles for Hepatocellular Carcinoma Diagnosis and Therapy	JOURNAL OF GASTROINTESTINAL AND LIVER DISEASES, 25, 375 - 383	Ungureanu, BS; Teodorescu, CM; Saftoiu, A	2016	0.735	0
25	Modeling the charge transfer at the electrode-ionic liquid interface in dielectric spectroscopy measurements	JOURNAL OF MOLECULAR LIQUIDS, 221, 422 - 433	Ganea, CP	2016	0.822	0
26	Photoexpansion in amorphous As2S3: A new explanation	JOURNAL OF NON-CRYSTALLINE SOLIDS, 447, 123 - 125	Lorinczi, A; Sava, F; Simandan, ID; Velea, A; Popescu, M	2016	2.761	0
27	Gamma irradiation effects on the properties of indium zinc oxide thin films	THIN SOLID FILMS, 614, 2 - 6	Craciun, D; Socol, G; Le Caer, S; Trinca, LM; Galca, AC; Pantelica, D; Ionescu, P; Craciun, V	2016	1.095	0

Nr .	Titlul articolului	Numele Jurnalului, Volumul, pagina nr.	Nume Autor	Anul publicării	<i>Scorul relative de influență al articolului</i>	Numărul de citări ISI
28	Influence of metallic and semiconducting nanostructures on the optical properties of dye-doped polymer thin films	THIN SOLID FILMS, 614, 31 - 35	Enculescu, M; Matei, E	2016	1.095	0
29	Growth of highly textured iridium thin films and their stability at high temperature in oxygen atmosphere	JOURNAL OF MATERIALS SCIENCE, 51, 8711 - 8717	Trupina, L; Nedelcu, L; Negrila, C; Banciu, MG; Huitema, L; Crunteanu, A; Rammal, M; Ghalem, A	2016	1.259	0
30	Dense, Regular GaAs Nanowire Arrays by Catalyst-Free Vapor Phase Epitaxy for Light Harvesting	ACS APPLIED MATERIALS & INTERFACES, 8, 22484 - 22492	Jin, JH; Stoica, T; Trellenkamp, S; Chen, Y; Anttu, N; Migunov, V; Kawabata, RMS; Buenconsejo, PJS; Lam, YM; Haas, F; Hardtdegen, H; Grutzmacher, D; Kardynal, BE	2016	3.253	0
31	Novel facile method for obtaining CdSe/polyaniline/C-60 composite materials	SCIENTIFIC REPORTS, 6, 32237	Rusen, E; Diacon, A; Mocanu, A; Nistor, LC	2016	3.435	0
32	Electrochromic properties of polyaniline-coated fiber webs for tissue engineering applications	INTERNATIONAL JOURNAL OF PHARMACEUTICS, 510, 465 - 473	Beregoi, M; Busuioc, C; Evangelidis, A; Matei, E; Iordache, F; Radu, M; Dinischiotu, A; Enculescu, I	2016	1.338	0
33	Transparent field-effect transistors based on AlN-gate dielectric and IGZO-channel semiconductor	APPLIED SURFACE SCIENCE, 379, 270 - 276	Besleaga, C; Stan, GE; Pintilie, I; Barquinha, P; Fortunato, E; Martins, R	2016	1.476	0
34	Effect of polyhedral oligomeric silsesquioxane nanoreinforcement on the properties of epoxy resin/monoglycidylether-terminated poly(dimethylsiloxane) nanocomposites	HIGH PERFORMANCE POLYMERS, 28, 724 - 734	Florea, NM; Lungu, A; Balanuca, B; Badica, P; Craciun, L; Damian, CM; Enculescu, M; Ionescu, C; Tihan, G; Iovu, H	2016	0.629	0

Nr .	Titlul articolului	Numele Jurnalului, Volumul, pagina nr.	Nume Autor	Anul publicării	<i>Scorul relative de influență al articolului</i>	Numărul de citări ISI
35	Ferritin surplus in mouse spleen 14 months after intravenous injection of iron oxide nanoparticles at clinical dose	NANO RESEARCH, 9, 2398 - 2410	Tamion, A; Hillenkamp, M; Hillion, A; Maraloiu, VA; Vlaicu, ID; Stefan, M; Ghica, D; Rositi, H; Chauveau, F; Blanchin, MG; Wiart, M; Dupuis, V	2016	5.505	0
36	Low level NO2 detection under humid background and associated sensing mechanism for mesoporous SnO2	SENSORS AND ACTUATORS B-CHEMICAL, 231, 166 - 174	Stanoiu, A; Somacescu, S; Calderon-Moreno, JM; Teodorescu, VS; Florea, OG; Sackmann, A; Simion, CE	2016	1.913	0
37	Effects of magnetic dipolar interactions on the specific time constant in superparamagnetic nanoparticle systems	JOURNAL OF PHYSICS D-APPLIED PHYSICS, 49, 295001	Iacob, N; Schinteie, G; Bartha, C; Palade, P; Vekas, L; Kuncser, V	2016	2.064	0
38	Aggregates of Mn ²⁺ ions in Mesoporous Self-Assembled Cubic ZnS:Mn Quantum Dots: Composition, Localization, Structure, and Magnetic Properties	JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C, 120, 14454 - 14466	Nistor, SV; Stefan, M; Nistor, LC; Kuncser, V; Ghica, D; Vlaicu, ID	2016	2.605	0
39	Optically Pumped GeSn Microdisk Lasers on Si	ACS PHOTONICS, 3, 1279 - 1285	Stange, D; Wirths, S; Geiger, R; Schulte-Braucks, C; Marzban, B; von den Driesch, N; Mussler, G; Zabel, T; Stoica, T; Hartmann, JM; Mantl, S; Ikonic, Z; Gruetzmacher, D; Sigg, H; Witzens, J; Buca, D	2016	5.442	1
40	STRUCTURAL AND MAGNETIC PROPERTIES OF Sr ₂ FeMoO ₆ OBTAINED AT LOW TEMPERATURES	DIGEST JOURNAL OF NANOMATERIALS AND BIOSTRUCTURES, 11, 773 - 780	Bartha, C; Plapcianu, C; Crisan, A; Enculescu, M; Leca, A	2016	0.309	0
41	Ultra-High Tunability of Ba _(2/3) Sr _(1/3) TiO ₃ -Based Capacitors Under Low Electric Fields	IEEE MICROWAVE AND WIRELESS COMPONENTS LETTERS, 26, 504 - 506	Ghalem, A; Rammal, M; Huitema, L; Crunteanu, A; Madrangeas, V; Dutheil, P; Dumas-Bouchiat, F; Marchet, P; Champeaux, C; Trupina, L; Nedelcu, L; Banciu, MG	2016	2.090	0

Nr .	Titlul articolului	Numele Jurnalului, Volumul, pagina nr.	Nume Autor	Anul publicării	Scorul relative de influență al articolului	Numărul de citări ISI
42	The tolerability of dextran-coated iron oxide nanoparticles during in vivo observation of the rats	GENERAL PHYSIOLOGY AND BIOPHYSICS, 35, 299 - 310	Popa, CL; Prodan, AM; Ciobanu, CS; Predoi, D	2016	0.369	2
43	Lignin fragmentation over magnetically recyclable composite Co@Nb2O5@Fe3O4 catalysts	JOURNAL OF CATALYSIS, 339, 209 - 227	Opris, C; Cojocaru, B; Gheorghe, N; Tudorache, M; Coman, SM; Parvulescu, VI; Duraki, B; Krumeich, F; van Bokhoven, JA	2016	4.593	0
44	Laser-induced forward transfer of carbon nanowalls for soft electrodes fabrication	APPLIED SURFACE SCIENCE, 374, 49 - 55	Constantinescu, C; Vizireanu, S; Ion, V; Aldica, G; Stoica, SD; Lazea-Stoyanova, A; Alloncle, AP; Delaporte, P; Dinescu, G	2016	1.476	0
45	Multi-stage pulsed laser deposition of aluminum nitride at different temperatures	APPLIED SURFACE SCIENCE, 374, 143 - 150	Duta, L; Stan, GE; Stroescu, H; Gartner, M; Anastasescu, M; Fogarassy, Z; Mihailescu, N; Szekeres, A; Bakalova, S; Mihailescu, IN	2016	1.476	1
46	High atomic diffusivity during pulsed laser irradiation of TiON quasi-amorphous films	APPLIED SURFACE SCIENCE, 374, 248 - 251	Teodorescu, VS; Maraloiu, AV; Negrea, RF; Ghica, D; Scarisoreanu, ND; Dinescu, M; Gartner, M; Blanchin, MG	2016	1.476	0
47	MAPLE preparation and characterization of mixed arylenevinylene based oligomers:C-60 layers	APPLIED SURFACE SCIENCE, 374, 278 - 289	Stanculescu, A; Socol, G; Vacareanu, L; Socol, M; Rasoga, O; Breazu, C; Girtan, M; Stanculescu, F	2016	1.476	0
48	Investigations of Ar ion irradiation effects on nanocrystalline SiC thin films	APPLIED SURFACE SCIENCE, 374, 339 - 345	Craciun, V; Craciun, D; Socol, G; Behdad, S; Boesl, B; Himcinschi, C; Makino, H; Socol, M; Simeone, D	2016	1.476	0
49	Flexible heterostructures based on metal phthalocyanines thin films obtained by MAPLE	APPLIED SURFACE SCIENCE, 374, 403 - 410	Socol, M; Preda, N; Rasoga, O; Breazu, C; Stavarache, I; Stanculescu, F; Socol, G; Gherendi, F; Grumezescu, V; Popescu-Pelin, G; Girtan, M; Stefan, N	2016	1.476	1

Nr.	Titlul articolului	Numele Jurnalului, Volumul, pagina nr.	Nume Autor	Anul publicării	Scorul relativ de influență al articolului	Numărul de citări ISI
50	Role of the dithiolate backbone on the passivation of p-GaAs(111)B surface	JOURNAL OF ELECTROANALYTICAL CHEMISTRY, 771, 56 - 63	Preda, L; Anastasescu, M; Dobrescu, G; Negrila, C; Lazarescu, V	2016	1.126	0
51	Assessment of structural, optical and conduction properties of ZnO thin films in the presence of acceptor impurities	JOURNAL OF PHYSICS-CONDENSED MATTER, 28, 224008	Plugaru, R; Plugaru, N	2016	2.012	2
52	AC magnetic response of superconducting YBa ₂ Cu ₃ O ₇ /PrBa ₂ Cu ₃ O ₇ superlattices	AIP ADVANCES, 6, 65027	Miu, L; Ivan, I; Ionescu, AM; Miu, D	2016	1.182	1
53	Amorphous thin films in the gallium-chalcogen system	PHYSICA STATUS SOLIDI B-BASIC SOLID STATE PHYSICS, 253, 1033 - 1037	Popescu, M; Sava, F; Lorinczi, A; Velea, A; Simandan, ID; Galca, AC; Matei, E; Socol, G; Gherendi, F; Savastu, D; Miclos, S	2016	1.094	0
54	Exciton-phonon interaction in CdS of different morphological forms manifested as stimulated Raman scattering	OPTICAL MATERIALS EXPRESS, 6, 1881 - 1895	Baibarac, M; Nila, A; Baltog, I	2016	2.156	0
55	Thermal analysis of ball-milled Fe-14Cr-3W-0.4Ti-0.25Y(2)O(3) ferritic steel powder Evidence for contamination from the air	JOURNAL OF THERMAL ANALYSIS AND CALORIMETRY, 124, 1179 - 1192	Mihalache, V	2016	0.688	0
56	Tellurium addition as a solution to improve compactness of ex-situ processed MgB ₂ -SiC superconducting tapes	SUPERCONDUCTOR SCIENCE & TECHNOLOGY, 29, 65012	Sandu, V; Aldica, G; Popa, S; Enculescu, M; Badica, P	2016	2.057	0
57	Intrinsic pyroelectric properties of thick, coarse grained Ba _{1-x} Sr _x TiO ₃ ceramics	CERAMICS INTERNATIONAL, 42, 10338 - 10348	Ianculescu, A; Pintilie, I; Vasilescu, CA; Botea, M; Iuga, A; Melinescu, A; Dragan, N; Pintilie, L	2016	3.000	0
58	Correlation between strain and defects in Bi implanted Si	JOURNAL OF PHYSICS AND CHEMISTRY OF SOLIDS, 93, 27 - 32	Palade, C; Lepadatu, AM; Slav, A; Ciurea, ML; Lazanu, S	2016	1.209	0

Nr.	Titlul articolului	Numele Jurnalului, Volumul, pagina nr.	Nume Autor	Anul publicării	Scorul relativ de influență al articolului	Numărul de citări ISI
59	Characteristics of Ce ³⁺ -doped barium titanate nanoshell tubes prepared by template-mediated colloidal chemistry	JOURNAL OF THE EUROPEAN CERAMIC SOCIETY, 36, 1633 - 1642	Ianculescu, AC; Vasilescu, CA; Trupina, L; Vasile, BS; Trusca, R; Cernea, M; Pintilie, L; Nicoara, A	2016	4.348	0
60	Up-conversion luminescence of BaCl ₂ :Er ³⁺ nanocrystals embedded in oxychloride nano-glass ceramic	JOURNAL OF THE EUROPEAN CERAMIC SOCIETY, 36, 1699 - 1703	Secu, M; Secu, CE	2016	4.348	0
61	Al ₂ O ₃ -cBN composites sintered by SPS and HPHT methods	JOURNAL OF THE EUROPEAN CERAMIC SOCIETY, 36, 1783 - 1789	Klimczyk, P; Cura, ME; Vlaicu, AM; Mercioniu, I; Wyzga, P; Jaworska, L; Hannula, SP	2016	4.348	0
62	Wicking behavior of fabrics described by simultaneous acquiring the images of the wet region and monitoring the liquid weight	COLLOIDS AND SURFACES A-PHYSICOCHEMICAL AND ENGINEERING ASPECTS, 497, 146 - 153	Cotorobai, VF; Zgura, I; Birzu, M; Frunza, S; Frunza, L	2016	1.052	0
63	CdS quantum dots sensitized TiO ₂ nanotubes by matrix assisted pulsed laser evaporation method	CERAMICS INTERNATIONAL, 42, 9011 - 9017	Bjelajac, A; Petrovic, R; Socol, G; Mihailescu, IN; Enculescu, M; Gruriezescu, V; Pavlovic, V; Janackovic, D	2016	3.000	1
64	First principle investigations of the structural, electronic and magnetic properties of predicted new zirconium based full-Heusler compounds, Zr ₂ MnZ (Z=Al, Ga and In)	JOURNAL OF MAGNETISM AND MAGNETIC MATERIALS, 406, 282 - 288	Birsan, A; Kuncser, V	2016	1.103	3
65	Joining Chemical Pressure and Epitaxial Strain to Yield Y-doped BiFeO ₃ Thin Films with High Dielectric Response	SCIENTIFIC REPORTS, 6, 25535	Scarisoreanu, ND; Craciun, F; Birjega, R; Ion, V; Teodorescu, VS; Ghica, C; Negrea, R; Dinescu, M	2016	3.435	0

Nr.	Titlul articolului	Numele Jurnalului, Volumul, pagina nr.	Nume Autor	Anul publicării	Scorul relativ de influență al articolului	Numărul de citări ISI
66	High temperature flexural strength in monolithic boron carbide ceramic obtained from two different raw powders by spark plasma sintering	JOURNAL OF THE CERAMIC SOCIETY OF JAPAN, 124, 587 - 592	Vasykiv, O; Demirskyi, D; Borodianska, H; Sakka, Y; Badica, P	2016	1.181	0
67	ELECTROCHEMICAL DEPOSITION OF ZINC TELLURIDE THIN FILMS FROM ETHALINE IONIC LIQUID	CHALCOGENIDE LETTERS, 13, 187 - 199	Catrangiu, AS; Beregoi, M; Cojocar, A; Anicai, L; Cotarta, A; Visan, T	2016	0.382	0
68	Graphene addition to MgB ₂ superconductor obtained by ex-situ spark plasma sintering technique	MATERIALS RESEARCH BULLETIN, 77, 205 - 211	Aldica, G; Burdusel, M; Popa, S; Hayasaka, Y; Badica, P	2016	0.981	0
69	Room and high temperature flexural failure of spark plasma sintered boron carbide	CERAMICS INTERNATIONAL, 42, 7001 - 7013	Vasykiv, O; Demirskyi, D; Badica, P; Nishimura, T; Tok, AIY; Sakka, Y; Borodianska, H	2016	3.000	3
70	ZnO nanowires grown directly on zinc foils by thermal oxidation in air: Wetting and water adhesion properties	MATERIALS LETTERS, 170, 156 - 159	Florica, C; Preda, N; Costas, A; Zgura, I; Enculescu, I	2016	1.116	5
71	RD50 Collaboration overview: Development of new radiation hard detectors	NUCLEAR INSTRUMENTS & METHODS IN PHYSICS RESEARCH SECTION A-ACCELERATORS SPECTROMETERS DETECTORS AND ASSOCIATED EQUIPMENT, 824, 422-425	Kuehn, S Group Author(s): RD50 Collaboration (include R. Radu si I. Pintilie)	2016	1.061	0
72	Fabrication of antimicrobial Silver-doped Carbon structures by combinatorial pulsed laser deposition	International Journal of Pharmaceutics, 515, 592-606	I. N. Mihailescu, D. Bociaga, G. Socol, G. E. Stan, M.C. Chifiriuc, C. Bleotu, M. A. Husanu, G. Popescu-Pelin, L. Duta, C. R. Luculescu, I. Negut, C. Hapenciuc, C. Besleaga I. Zgura, F. Miculescu	2016	1.338	0
Publicate on-line, acceptate sau submise						

Nr.	Titlul articolului	Numele Jurnalului, Volumul, pagina nr.	Nume Autor	Anul publicării	Scorul relativ de influență al articolului	Numărul de citări ISI
1	Long-range magnetic interaction in Mn_xGe_{1-x} : structural, spectromicroscopic and magnetic investigations	Journal of Materials Science, acceptat (17.11.2016), publicat online doi: 10.1007/s10853-016-0618-9, 2017	L.C. Tănase, G.A. Lungu, L.E. Abramiuc, I.C. Bucur, N.G. Apostol, R.M. Costescu, C.A. Tache, D. Macovei, A. Barinov, C.M. Teodorescu	2016	1.259	
2	Wet chemical synthesis of ZnO-CdS composites with enhanced photocatalytic activity	Trimis la Appl. Surf Sci. in octombrie 2016	I. Zgura, N. Preda, G. Socol, L. Frunza, M. Enculescu, I. Negut, C. P. Ganea, L. Nedelcu, C. Negrila, F. Cotorobai, S. Frunza	2016	1.476	
3	Voltammetric and atomic force microscopy characterization of chymotrypsin, trypsin and caspase activities of proteasome	Catalysis Today	Catarina Sofia Henriques de Jesus, Ana-Maria Chiorcea Paquim, Victor Constantin Diculescu	(Minor revision)	2.973	
4	Low energy electron diffraction from ferroelectric surfaces. Dead layers and surface dipoles in ultraclean $Pb(Zr,Ti)O_3(001)$	Sci. Rep.,	C.M. Teodorescu, L. Pintilie, N.G. Apostol, L.C. Tănase, I.C. Bucur, A.E. Bocîrnea, R.M. Costescu, G.A. Lungu, L. Hrib, C.A. Tache	Submis (2016).	3.435	
5	Structural and magnetic properties of Ni nanofilms on Ge(001) by molecular beam epitaxy	Appl. Surf. Sci.,	A.E. Bocirnea, R.M. Costescu, I. Pasuk, G.A. Lungu, C.M. Teodorescu	Submis (2016).	1.476	
6	Band bending in Ni/Ge(001) interface investigated by photoelectron spectroscopy	Appl. Surf. Sci.	A.E. Bocirnea, L.C. Tanase, R.M. Costescu, N.G. Apostol, C.M. Teodorescu	submis (2016)	1.476	
7	Atomistic simulations of methylammonium lead halide layers on $PbTiO_3(001)$ surfaces	Physical Chemistry Chemical Physics	N. Plugaru, G. A. Nemnes, L. Filip, I. Pintilie, L. Pintilie, K. T. Butler, and A. Manolescu	in proces de revizie	2.086	
8	Superconductivity in MgB_2 irradiated with energetic protons	Physica C: Supercond. Appl. 528 27-34 (2016) DOI:10.1016/j.physc.2016.07.006	V. Sandu, L. Craciun, A. M. Ionescu, G. Aldica, L. Miu, A. Kuncser	2016	0.567	

Nr.	Titlul articolului	Numele Jurnalului, Volumul, pagina nr.	Nume Autor	Anul publicării	Scorul relativ de influență al articolului	Numărul de citări ISI
9	Magnetite-based glass-ceramics prepared by controlled crystallization of borosilicate glasses: effect of nucleating agents on magnetic properties and relaxation	Ceram. Intern. doi.org/10.1016/j.ceramint.2016.11.188	V. Sandu, E. Cimpoiasu, S. Greculeasa, A. Kuncser, M. S. Nicolescu, V. Kuncser	2016	3.000	
10	Effect of P ₂ O ₅ on the structural and magnetic properties of magnetite-based glass-ceramics	J. Am. Ceram. Soc, 99 (12) 4013–4021 (2016) DOI: 10.1111/jace.1445	V. Sandu, S. Greculeasa, A. Kuncser, V. Kuncser	2016	4.277	
11	Berry phase polarization: Interpreting multivalued polarization results and optimization strategy	Physical Review B	L. D. Filip and N. Plugaru	submisie	2.885	
12	Study of polarization dependence on the thickness of PbTiO ₃ thin layers	Journal of Physics: Condensed Matter	L. D. Filip and N. Plugaru	submisie	2.012	
13	Non-isothermal crystallization kinetics growth of LiYF ₄ (Yb,Er) nanoparticles	Ceramics International, 42 18732-18736	C. Bartha, C.E. Secu and M. Secu	2016	3.000	
14	LEED from ferroelectric surfaces	Applied Surface Science	Nicoleta G. Apostol, Liviu C. Tănase, Ioana C. Bucur, Amelia E. Bocîrnea, Ruxandra M. Costescu, George A. Lungu, Luminița Hrib, Lucian Pintilie, Cristian M. Teodorescu	In submisie 2016	1.476	
15	Comparative physical, chemical and biological assessment of simple and titanium-doped ovine dentine-derived hydroxyapatite coatings fabricated by pulsed laser deposition	Ceramic International	L. Duta, N. Mihailescu, A.C. Popescu, C. Luculescu, I.N. Mihailescu, G. Çetin, O. Gunduz, F.N. Oktar, A.C. Popa, A. Kuncser, C. Besleaga, G.E. Stan	Submis 2016	3.000	

Nr.	Titlul articolului	Numele Jurnalului, Volumul, pagina nr.	Nume Autor	Anul publicării	Scorul relative de influență al articolului	Numărul de citări ISI
16	Organic light emitting tranzistors with low power consumption	Journal of Applied Physics	C.C. Ciobotaru, I.C. Ciobotaru, S. Polosan	In submisie 2016	1.569	

4.2.2. Lucrări/comunicări științifice prezentate/publicate la manifestări științifice (conferințe, seminarii, workshops, etc):

Nr. crt.	Titlul articolului, Manifestarea științifică, Volumul, Pagina nr.	Nume Autor	An apariție	Nr. citări ISI
1.	Structural and magnetic properties of Ni nanofilms grown by molecular beam epitaxy on heated Ge(001) substrates", 11th International Conference On Physics Of Advanced Materials (ICPAM-11), Cluj-Napoca, Romania, 8-14th September 2016	Amelia Bocirnea, Ruxandra Costescu, Adrian Lungu, Iuliana Pasuk, Dan Macovei, Cristian Teodorescu Prezentare orala 13/09/2016	2016	
2.	"Growth mechanisms and band bending effects in Ni on Ge(001) investigated by XPS and LEED", ICPAM-11, Cluj-Napoca, Romania 8-14th September 2016, oral presentation	Amelia Elena Bocirnea, Maria Ruxandra Costescu, Liviu Cristian Tanase, Nicoleta Georgiana Apostol, Cristian Mihail Teodorescu Prezentare orala 8/09/2016	2016	
3	Wet chemical synthesis of ZnO-CdS composites with enhanced photocatalytic activity/ 10Th International Conference on Photoexcited Processes and applications, August 29 – September 2, 2016, Brasov, Romania	I. Zgura, G. Socol, N. Preda, L. Frunza, L. Diamandescu, M. Enculescu, L. Nedelcu, C. P. Ganea, S. Frunza	2016	
4	"Selective exchange effects in single-Mn doped quantum dots" - "International Workshop of Materials Physics", Magurele, Romania, 23 mai 2016 http://www.infim.ro/events/international-workshop-materials-physics	Radu Dragomir, prezentare orala	2016	
5	Geometrical effects on exciton dynamics in magnetic quantum dots", "32nd International Physics Congress of the Turkish Physical Society (TPS-32) 06-09 Sep 2016, Bodrum, Turcia.	V. Moldoveanu, prezentare orala	2016	
6	Graphene-like layers grown on ferroelectrics, The 16th International Balkan Conference on Applied Physics (IBWAP 2016) , Constanța, Romania, July 7 th – 9 th , 2016,.	Cristian Mihail Teodorescu lucrare invitata (09/07/2016)	2016	
7	Surface reactions on ferroelectrics single crystal films, The 11th International Symposium of the Romanian Catalysis Society (RomCat 2016) , Timișoara, Romania, June 6 th – 8 th , 2016,	Liviu C. Tănase, Laura E. Abramiuc, Nicoleta G. Apostol, George A. Lungu, Ioana C. Bucur, Dana G. Popescu, Marius A. Hușanu, Luminița Hrib, Lucian Trupină, Lucian Pintilie, Cristian M. Teodorescu	2016	

		oral presentation (06/06/2016).		
8	Band bending at Pt/PZT interfaces investigated by XPS spectroscopy, European Conference on Surface Science (ECOSS 32) , Grenoble, France, Aug. 28 th – Sept 2 nd , 2016,	Cristina Bucur, Laura Abramiuc, Adrian Lungu, Liviu Tanase, Cristian Tache, Cristian Teodorescu oral presentation (31/08/2016).	2016	
9	Band bending in Au/BaTiO ₃ and Cu/BaTiO ₃ investigated by X-ray photoelectron spectroscopy, 5th Portuguese Young Chemists Meeting (5th PYChem) - 1st European Young Chemists Meeting , Guimaraes, Portugal, April 26 th – 29 th , 2016.	Dana G. Popescu, Marius A. Husanu, Liviu C. Tanase, Laura E. Stoflea, oral presentation	2016	
10	Photoelectron spectromicroscopy of Pb(Zr,Ti)O ₃ (001) and (111) surfaces, International Workshop of Materials Physics , Măgurele, Romania, May 23 th – 25 th , 2016,.	D.G. Popescu, L.E. Abramiuc oral presentation (23/05/2016)	2016	
11	Chemistry of carbon and carbon monoxide on Pb(Zr,Ti)O ₃ (001) surfaces, International Workshop of Materials Physics , Măgurele, Romania, May 23 th – 25 th , 2016,	N.G. Apostol oral presentation (24/05/2016).	2016	
12	Interface electronic structure in BaTiO ₃ /La _{1-x} Sr _x MnO ₃ ferroelectric-ferromagnetic system, The 16th International Balkan Conference on Applied Physics (IBWAP 2016) , Constanța, Romania, July 7 th – 9 th , 2016,.	Dana G. Popescu, Marius A. Husanu, poster	2016	
13	Optimization of geometry parameters for a 2D photonic crystal for optimal light manipulation, International Colloquium 'Physics of Materials' – PM-5 , Bucharest, Romania, November 10 th – 11 th , 2016,	Dana G. Popescu, Marius A. Husanu, poster.	2016	
14	Interface states with momentum resolution in BaTiO ₃ /La _{1-x} Sr _x MnO ₃ ferroelectric - ferromagnetic heterostructure, 39th International conference on Vacuum Ultraviolet and X-ray Physics , Zurich, Switzerland, July 3 rd – 8 th , 2016,	Marius A. Husanu, Dana G. Popescu, Vladimir Strocov, Thomas Schmitt poster.	2016	
15	Electron-doped manganite films as channels in ferroelectric Mott Transistors, MRS Spring Meeting & Exhibit , March 28 th – April 1 st , 2016,	Anke Sander, Vincent Garcia, Vladimir Strocov, Federico Bisti, Marius-Adrian Husanu, J Rault, Francois Bertran, Patrick Lefevre, Ashima Arora, S. Valencia, Hiroyuki Yamada, Cecile Carretero, Agnes Barthelemy, M. Bibes oral presentation (30/03/2016).	2016	
16	Different strategies for the growth of epitaxial graphene monolayers, WE: Perspective în sinteza, investigarea și aplicațiile materialelor, Conferința Diaspora în Cercetarea Științifică și Invățământul Superior din România , Timișoara, Romania, 25 – 28 aprilie 2016,	Cristian Alexandru Tache, Francesco Pressel, Paolo Lacovig, Silvano Lizzit, Alessandro Baraldi Lucreare invitată (26/04/2016).	2016	
17	Chimie și cataliză la suprafețe feroelectrice, WE: Perspective în sinteza,	Cristian M. Teodorescu Lucreare invitată (27/04/2016).	2016	

	<i>investigarea și aplicațiile materialelor, Conferința Diaspora în Cercetarea Științifică și Invățământul Superior din România, Timișoara, Romania, 25 – 28 aprilie 2016,</i>			
18	<i>CoSMoS: prima facilitate românească instalată pe o sursă de radiație de sincrotron, WE: Colaborarea internațională în cercetarea din fizică, Conferința Diaspora în Cercetarea Științifică și Invățământul Superior din România, Timișoara, Romania, 25 – 28 aprilie 2016,</i>	<i>Cristian M. Teodorescu Lucrare invitată (27/04/2016).</i>	2016	
19	<i>QRTEM investigation on growth evolution of the residual strain in epitaxial films, 6th International Conference on NANOstructures and nanomaterials SEI-Assembly, NANOSEA 2016, July 3rd-8th, 2016 - Giardini Naxos (ME), Italy –</i>	<i>C. Ghica, R. F. Negrea, V. S. Teodorescu, C. F. Chirila, L. Pintilie poster</i>	2016	
20	<i>On the evolution of the residual strain in thin epitaxial films by HRTEM quantification and nanoscale mapping 8th International Conference on Nanomaterials - Research & Application, NANOCON 2016, October 19th - 21st 2016, Brno, Czech Republic</i>	<i>C. Ghica, R. F. Negrea, V. S. Teodorescu, C. F. Chirila, N. D. Scarisoreanu prezentare orală</i>	2016	
21	<i>Layering and Defect Formation in Proton Irradiation MgB₂, International MultiSuper Workshop “Novel Quantum Phenomena in Ultra Thin Superconductors”, University of Camerino, Italy, 7-8 April 2016</i>	<i>V. Sandu, (oral presentation)</i>	2016	
22	<i>Graphene-like layers grown on ferroelectrics, The 16th International Balkan Conference on Applied Physics (IBWAP 2016), Constanța, Romania, July 7th – 9th, 2016, invited (09/07/2016).</i>	<i>Cristian Mihail Teodorescu</i>	2016	
23	<i>Surface reactions on ferroelectrics single crystal films, The 11th International Symposium of the Romanian Catalysis Society (RomCat 2016), Timișoara, Romania, June 6th – 8th, 2016, oral presentation (06/06/2016).</i>	<i>Liviu C. Tănase, Laura E. Abramiuc, Nicoleta G. Apostol, George A. Lungu, Ioana C. Bucur, Dana G. Popescu, Marius A. Hușanu, Luminița Hrib, Lucian Trupină, Lucian Pintilie, Cristian M. Teodorescu</i>	2016	
24	<i>Chimie și cataliză la suprafețe feroelectrice, WE: Perspective în sinteza, investigarea și aplicațiile materialelor, Conferința Diaspora în Cercetarea Științifică și Invățământul Superior din România, Timișoara, Romania, 25 – 28 aprilie 2016, invitată (27/04/2016).</i>	<i>Cristian M. Teodorescu</i>	2016	
25	<i>Thin film metal-ferroelectric-metal current voltage characteristics: An electron tunnelling approach Electroceramics XV, Limoges, France, 27-29 June 2016. Oral presentation</i>	<i>Lucian D. Filip and Lucian Pintilie</i>	2016	

26	Leakage current for thin film metal-ferroelectric-metal devices 5th International Symposium on Next-Generation Electronics, ISNE 2016, Hsinchu, Taiwan, 3-6 May 2016. Poster presentation	Lucian D. Filip, Lucian Pintilie, Wing-Shan Tam and Chi-Wah Kok	2016	
27	The influence of the interlayer type on ferroelectric/dielectric characteristics of multilayered structures ELECTROCEAMICS XV, 27-29 June 2016, Limoges, France,	A. Boni, C. Chirila, L. Hrib, R. Negrea, I. Pasuk, C. Ghica, L. Filip, I. Pintilie, L. Pintilie	2016	
28	Electrical properties of epitaxial ferroelectric heterostructures EMN Budapest Meeting, 9-13 September 2016, Budapest, Hungary,	A.G. Boni, C. Chirila, L. Hrib, R. Negrea, C. Ghica, L. Trupina, I. Pasuk, I. Pintilie, L. Pintilie	2016	
29	Epitaxial ferroelectric thin films grown by pulsed laser deposition (PLD) EMN Budapest Meeting, 9-13 September 2016, Budapest, Hungary,	C Chirila, A. Boni, L. Hrib, L. Trupina, I. Pasuk, R. Negrea, C. Ghica, I. Pintilie, and L. Pintilie	2016	
30	Polarization and interfaces driven effects in ferroelectric/multiferroic heterostructures Asian Meeting on Ferroelectrics 7-11 November, New Delhi, India	L. Pintilie	2016	
31	Wet chemical synthesis of ZnO-CdS composites with enhanced photocatalytic activity 10th Intern. Conf. Photoexcited Processes and Applications, Brasov, Romania, August 29 - September 2, 2016, Poster P118	I. Zgura, G. Socol, N. Preda, L. Frunza, L. Diamandescu, M. Enculescu, L. Nedelcu, C. P. Ganea, S. Frunza	2016	
32	Boundary conditions at electrode ionic liquid interface for dielectric spectroscopy measurements 9th International Conference on Broadband Dielectric Spectroscopy and its Applications, BDS 2106, September 11 - 16, 2016, Pisa, Italy	C.-P. Ganea, M.-G. Banciu	2016	
33	Coordination polymers of zinc ions obtained from ligands containing parts with two carboxylic groups and with aromatic amides: synthesis and physical properties 5th International Colloquium "Physics of Materials", Bucuresti, 10-11 Noiembrie 2016 Poster	I. Zgura, C.P. Ganea, V.F. Cotorobai, A.A. Sorescu, A. Nuta, L. Frunza	2016	
34	Stability in perovskite solar cells, International Workshop of Materials Physics, Magurele 23-25 mai 2016	C. Besleaga, V. Stancu, A.G. Tomulescu, M. Sima, L. Stoflea, L. Pintilie, I. Pintilie,	2016	
35	Effect of heavy ions irradiation on the properties of benyl crystals, ICPSCG 10, Zakopane Polonia, 16-21 Octombrie 2016.	F. Stanculescu, A. Stanculescu, M. Socol,	2016	
36	Effect of carbon allotropes thin films on beta-amyloid aggregation EMRS 2016, May, Lille, France;	C. Breazu, O. Rasoga, M. Socol, F. Stanculescu, G. Socol, V. Grumezescu, A. Stanculescu,	2016	

37	MAPLE prepared oligoazomethine: fullerene derivative mixed layer for photovoltaic applications, EMRS 2016, may, Lille , France;	A. Stanculescu, O. Rasoga, M. Socol, L. Vacareanu, M. Grigoras, G. Socol, F. Stanculescu, C. Breazu, M. Girtan, C. Breazu, M. Socol, N. Preda, A. Stanculescu, F. Stanculescu, M. Gartan, G.Socol, O.Rasoga,	2016	
38	Effect of nano-patterning on the properties of the organic heterostructures prepared on Si substrate, EMRS 2016, may, Lille , France;	C. Breazu, M. Socol, N. Preda, A. Stanculescu, F. Stanculescu, M. Gartan, G.Socol, O.Rasoga,	2016	
39	Organic heterostructures deposited by MAPLE on AZO substrate , ICPEPA 2016, 30 aug.-03 sept., Brasov, Romania;	G. Socol, M Socol, N. Preda, A. Stanculescu, C. Breazu, F. Stanculescu, S. Iftimie, M. Girtan,	2016	
40	MAPLE prepared heterostructures with oligoazomethine: fullerene derivative mixed layer for photovoltaic applications , ICPEPA 2016, 30 aug.-03 sept., Brasov, Romania;	A. Stanculescu, M. Socol, O. Rasoga, L. Vacareanu, M. Grigoras, G. Socol, F. Stanculescu, C. Breazu, M. Girtan,	2016	
41	Effect of aluminum electrode nano-patterning on the properties of the laser prepared arylenevinylene polymer based mixed layer, ICPEPA 2016, 30 aug.-03 sept., Brasov, Romania;	O. Rasoga , A. Stanculescu, G. Socol, A. M. Catargiu, M. Grigoras, C. Breazu, M. Socol, E. Matei, F. Stanculescu, M. Girtan,	2016	
42	On the properties of organic heterostructures prepared on nano-patterned electrode ICPAM 2016, septembrie 08-11, Cluj, Romania;	C. Breazu, M. Socol, N. Preda, R. Mallet , A. Stanculescu, F. Stanculescu, M. Girtan, O. Rasoga,	2016	
43	The properties of organic heterostructures deposited on nanostructured metallic substrates for optoelectronic applications, ICPAM 2016, septembrie 08-11, Cluj, Romania.	M. Socol, G. Socol, C. Breazu, N. Preda ¹ , C. Florica, O. Rasoga, A. Stanculescu, F. Stanculescu, M. Girtan , F.H. Swart,	2016	
44	Small-scale areas of titanium modified by laser irradiation for tissue engineering and cellular spreading control, EMRS 2016, may, Lille , France	F. Sima, E. Axente, L.E. Sima, M. Chiritoiu, A. Visan, G. Dorcioman, D. Milovanovic, C. Luculescu, M. Socol, I. Zgura, G. Socol,	2016	
45	Improved osteoblast adhesion on hydroxyapatite thin films capped with fibronectin, EMRS 2016, may, Lille , France;	G. Popescu-Pelin, F. Sima, G. Socol, C.N. Mihailescu, M. Socol, C. Luculescu, L. Sima, I. Iordache, C. Ristoscu, I. N. Mihailescu,	2016	
46	Lysozyme embedded into degradable polymers blends for antimicrobial applications, EMRS 2016, may, Lille , France	A. Visan, N. Stefan, M. Miroiu, C. Nita, G. Dorcioman, O. Rasoga, I. Zgura, C. Breazu, I. Iordache, A. Stanculescu, R. Cristescu, M.C. Chifiriuc, L. Sima, I.N. Mihailescu, G. Socol,	2016	

4.2.3. Lucrări publicate în alte publicații relevante:

Nr.	Titlul articolului	Numele Jurnalului, Volumul, Pagina nr.	Nume Autor	Anul publicării
1.	Bioactive glass thin films synthesized by advanced pulsed laser techniques	J Phys: Conf Series	N. Mihailescu, G.E. Stan, C. Ristoscu, M. Sopronyi, I.N. Mihailescu	Submis 2016

4.2.4. Studii, Rapoarte, Documente de fundamentare sau monitorizare care:

a) au stat la baza unor politici sau decizii publice:

Tip documet	Nr.total	Publicat în:
Hotărâre de Guvern		
Lege		
Ordin ministru		
Decizie președinte		
Standard		
Altele (<i>se vor preciza</i>)		

b) au contribuit la promovarea științei și tehnologiei - evenimente de mediatizare a științei și tehnologiei:

Tip eveniment	Nr. apariții	Nume eveniment:
web-site	permanent	www.infim.ro
Emisiuni TV		
Emisiuni radio		
Presă scrisă/electronică	3	Market Watch
Cărți		
Reviste		
Bloguri		
Altele (<i>se vor preciza</i>)	3	Workshop-prima editie a International Workshop on Materials Physics; Scoala Altfel; vizita elevi de la Liceul German "Hermann Oberth"

4.3. Tehnologii, procedee, produse informatice, rețele, formule, metode și altele asemenea:

Tip	2016
Tehnologii (materiale)	20
Procedee	-
Produse informatice	-
Rețele	-
Formule	
Metode (procesare, producere, caracterizare)	6
Altele asemenea (<i>se vor specifica</i>)	

--	--

Din care:

4.3.1 Propuneri de brevete de invenție, certificate de înregistrare a desenelor și modelelor industriale și altele asemenea:

	Nr.propuneri brevete	Anul înregistrării	Autorul/Autorii	Numele propunerii de brevet
OSIM	A/00677	2016	Ghiță Rodica, Logofătu Constantin, Negrilă Constantin-Cătălin, Frumosu Florica, Predoi Daniela	1. Obținerea de compuși oxidici pe suprafața n-GaSb
	A/00747	2016	Stan George, Pintilie Ioana, Beșleagă Stan Cristina, Botea Mihaela, Dobrescu Gabriel, Cioca Mihai, Culea Liviu, Soare Petre, Pintilie Lucian	2. Element de detecție piroelectrică pentru lucru la temperaturi ridicate
	A/00873	2016	Banciu Marian Gabriel, Nedelcu Liviu, Geambașu Cezar Dragoș, Lucian Trupină, Militaru Nicolae Gheorghe, Nicolaescu Ioan	3. Antenă de microunde cu rezonatori din materiale dielectrice diferite
	A/00723	2016	Slav Adrian, Palade Cătălin, Lepadatu Ana-Maria, Lazanu Sorina, Ciurea Lidia Magdalena, Vasilache Dan, Dr. Dragoman Mircea	4. Matrice capacitivă pentru memorie nevolatilă bazată pe nanocristale de germaniu imersate în dioxid de hafniu și procedeu de realizare a acesteia
	A/00483	2016	Predoi Daniela, Ciobanu Steluța Carmen, Popa Cristina-Liana, Iconaru Simona Liliana	5. Metodă de obținere a hidroxiapatitei dopată cu zinc în matrice de colagen pentru aplicații biomedicale
EPO				
USPTO				

4.4. Structura de personal:

Personal CD (Nr.)	2016
Total personal	273
Total personal CD	199
cu studii superioare	174
cu doctorat	135
doctoranzi	16

4.4.1 Lista personalului de cercetare care a participat la derularea Programului-nucleu:

Nr.	Nume și prenume	Grad	Funcția	CNP	Echivalent normă întreagă	Anul angajării	Nr. Ore lucrate/An*
1.		CS/IDT					
2.							

* Se vor specifica numărul de ore lucrate în fiecare dintre anii de derulare ai Programului Nucleu, prin inserarea de coloane

4.5. Infrastructuri de cercetare rezultate din derularea programului-nucleu. Obiecte fizice și produse realizate în cadrul derulării programului; colecții și baze de date conținând înregistrări analogice sau digitale, izvoare istorice, eșantioane, specimene, fotografii, observații, roci, fosile și altele asemenea, împreună cu informațiile necesare arhivării, regăsirii și precizării contextului în care au fost obținute:

Nr.	Nume infrastructură/obiect/bază de date...	Data achiziției	Valoarea achiziției (lei)	Sursa finanțării	Valoarea finanțării infrastructurii din bugetul Progr. Nucleu	Nr. Ore-om de utilizare a infrastructurii pentru Programul-nucleu
1.						
2.						

5. Rezultatele Programului-nucleu au fundamentat alte lucrări de cercetare:

	Nr.	Tip
Proiecte internaționale	14	Orizont 2020 (M-ERA NET, Teaming), COST, Brancusi, IFA-CEA, ANR, EEA-Norvegia
Proiecte naționale	88	PNCDI III

6. Rezultate transferate în vederea aplicării :

Tip rezultat	Instituția beneficiară (nume instituție)	Efecte socio-economice la utilizator
Ex. tehnologie, studiu	nume IMM/instituție	

7. Alte rezultate: (a se specifica, dacă este cazul).

Premii la targuri si expozitii (16 diplome si medalii)

Salon International	Premiu	Inventie	Autorii exponatului premiat
PRO INVENT 2016	DIPLOMA DE EXCELENȚA SI MEDALIE DE AUR	DETECTOR PIRELECTRIC CU AMPLIFICARE OPTICA, PENTRU OPERARE LA TEMPERATURA RIDICATA	L. PINTILIE, G. STAN, I. PINTILIE, M. BOTEA, A. IUGA, A. GAVRILA, G. DOBRESU, M. CIOCA, L. CULEA, P. SOARE
	DIPLOMA DE EXCELENȚA SI MEDALIE DE AUR	COMPOZITE STRATIFICATE MULTI-METAL, MULTI-CERAMICA	M. GALATANU, G. RUIU, S. CRETU, M. ENCULESCU, A. GALATANU

	DIPLOMA DE EXCELENTA SI MEDALIE DE AUR	MATERIAL SUPRACONDUCTOR PRELUCRABIL MECANIC SI CONCENTRATOR/STOCATOR DE CAMP MAGNETIC	G. ALDICA, M. BURDUSEL, P. BADICA
	BRONZE MEDAL (UNIVERSITATEA STEFAN CEL MARE SUCEAVA)	CELULA SOLARA HIBRIDA	I. PINTILIE, C. BESLEAGASTAN, V. STANCU, A. TOMULESCU, M. SIMA, M. MIHALCEA, L. PINTILIE
	DIPLOMA DE EXCELENTA (CORNELIU GROUP)	MATERIAL SUPRACONDUCTOR PRELUCRABIL MECANIC SI CONCENTRATOR/STOCATOR DE CAMP MAGNETIC	G. ALDICA, M. BURDUSEL, P. BADICA
	DIPLOMA DE EXCELENTA	DETECTOR PIROELECTRIC DIN CERAMICA MASIVA CU GRADIENT DE CONCENTRATIE	L. PINTILIE, I. PINTILIE, M. BOTEA, A. IUGA, M. CIOCA, L. CULEA, P. SOARE, G. DOBRESCU, A. GAVRILA
	DIPLOMA DE EXCELENTA	CELULA SOLARA HIBRIDA	I. PINTILIE, C. BESLEAGASTAN, V. STANCU, A. TOMULESCU, M. SIMA, M. MIHALCEA, L. PINTILIE
	SPECIAL AWARD (CORNELIU GROUP)	DETECTOR PIROELECTRIC DIN CERAMICA MASIVA CU GRADIENT DE CONCENTRATIE	L. PINTILIE, I. PINTILIE, M. BOTEA, A. IUGA, M. CIOCA, L. CULEA, P. SOARE, G. DOBRESCU, A. GAVRILA
EUROINVENT 2016	GOLD MEDAL	PYROELECTRIC DETECTOR FROM BULK CERAMIC WITH CONCENTRATION GRADIENT	L. PINTILIE, I. PINTILIE, M. BOTEA, A. IUGA, M. CIOCA, L. CULEA, P. SOARE, G. DOBRESCU, A. GAVRILA
	GOLD MEDAL	HYBRID SOLAR CELL	I. PINTILIE, C. BESLEAGASTAN, V. STANCU, A. TOMULESCU, M. SIMA, M. MIHALCEA, L. PINTILIE
	SILVER MEDAL	OPTOELECTRONIC DEVICE WITH ELECTRICALLY CONFIGURABLE METASURFACE FOR CONTROLLING THE POLARIZATION OF LIGHT AND GETTING THE OPTICAL RESOLUTION BELOW THE CLASSIC DIFFRACTION LIMIT	COSTEL COTIRLAN-SIMIONUC, ADRIAN RIZEA, DANUT VASILE URSU
	SILVER MEDAL	PYROELECTRIC DETECTOR WITH OPTICAL AMPLIFICATION, FOR OPERATING AT HIGH TEMPERATURE	L. PINTILIE, G. STAN, I. PINTILIE, M. BOTEA, A. IUGA, A. GAVRILA, G. DOBRESCU, M. CIOCA, L. CULEA, P. SOARE
	BRONZE MEDAL	LAYERED MULTI-METALS-MULTI-CERAMICS COMPOSITES	M. GALATANU, G. RUIU, S. CRETU, M. ENCULESCU, A. GALATANU
	BRONZE MEDAL	SUPERCONDUCTING MATERIAL, MACHINED BY CUTTING TOOLS, AND A MAGNETIC FIELD CONCENTRATOR/STORAGE DEVICE	G. ALDICA, M. BURDUSEL, P. BADICA
	CERTIFICATE OF ATTENDANCE	LAYERED MULTI-METALS-MULTI-CERAMICS COMPOSITES	M. GALATANU, G. RUIU, S. CRETU, M. ENCULESCU, A. GALATANU
	CERTIFICATE OF ATTENDANCE	SUPERCONDUCTING MATERIAL, MACHINED BY CUTTING TOOLS, AND A MAGNETIC FIELD CONCENTRATOR/STORAGE DEVICE	G. ALDICA, M. BURDUSEL, P. BADICA
	CERTIFICATE OF ATTENDANCE	METHOD OF OBTAINING ONE-DIMENSIONAL NANOSTRUCTURES OF ZINC OXIDE BY IN AIR THERMAL OXIDATION OF ZINC	C. FLORICA, N. PREDA, A. COSTAS, A. EVANGHELIDIS, M. OANCEA, M. ENCULESCU, E. MATEI, I. ENCULESCU

	CERTIFICATE OF ATTENDANCE	HYBRID SOLAR CELL	I. PINTILIE, C. BESLEAGASTAN, V. STANCU, A. TOMULESCU, M. SIMA, M. MIHALCEA, L. PINTILIE
	CERTIFICATE OF ATTENDANCE	PYROELECTRIC DETECTOR FROM BULK CERAMIC WITH CONCENTRATION GRADIENT	L. PINTILIE, I. PINTILIE, M. BOTEA, A. IUGA, M. CIOCA, L. CULEA, P. SOARE, G. DOBRESCU, A. GAVRILA
	CERTIFICATE OF ATTENDANCE	PYROELECTRIC DETECTOR WITH OPTICAL AMPLIFICATION, FOR OPERATING AT HIGH TEMPERATURE	L. PINTILIE, G. STAN, I. PINTILIE, M. BOTEA, A. IUGA, A. GAVRILA, G. DOBRESCU, M. CIOCA, L. CULEA, P. SOARE
	CERTIFICATE OF ATTENDANCE	OPTOELECTRONIC DEVICE WITH ELECTRICALLY CONFIGURABLE METASURFACE FOR CONTROLLING THE POLARIZATION OF LIGHT AND GETTING THE OPTICAL RESOLUTION BELOW THE CLASSIC DIFFRACTION LIMIT	COSTEL COTIRLAN-SIMIONUC, ADRIAN RIZEA, DANUT VASILE URSU

International Workshop of Materials Physics



INTERNATIONAL WORKSHOP
OF MATERIALS PHYSICS

Dates: **May 23-25 2016**

Venue: **NIMP Conference Hall, 405A Atomistilor Str., Magurele**

Program: [Download](#)

The **National Institute of Materials Physics (NIMP)** is a lead scientific institution in Romania, determined to become an excellence research center at European level. Its current research topics are related to solid state physics and materials science, with special focus on oxide materials, organic-inorganic composites and hybrid structures, dedicated for applications ranging from electronics and life sciences to green energy or nuclear fusion reactors. The Institute has a modern infrastructure, covering various preparation/deposition methods and a wide number of characterization techniques, highly qualified personnel and a significant number of collaborations with research institution from abroad.

The **International Workshop of Materials Physics** organized by NIMP aims at becoming a periodic forum in the exchange of ideas between the local researchers and distinguished members of the international research community in the field. Presentations will be both related to scientific breakthroughs and success stories of applications of research results in industry.

Accordingly, the extra - scientific topics of the workshop for its first edition will be covering the following aspects:

- *Connecting NIMP to new hot research topics* with the aim to develop new collaborations of high potential success for EU project applications (with special emphasis on novel materials and interface with life sciences)
- *Increasing attractiveness for foreign researchers* to come and work at NIMP (with the possibility to apply for ERA-Chair projects or ERC grants)
- *Increasing the performance and improving the image of NIMP's researchers* in order to successfully apply for ERC grants (learning from the experience of ERC grantees)

- Learning good practices for improving excellence in research, with special emphasis on the innovative aspects and the general relation with the industry (including discussions regarding application for TEAMING and TWINNING projects)

PROGRAM

23RD OF MAY

2016

08:30 - 09:00

REGISTRATION

09:00 - 09:15

OPENING (GENERAL DIRECTOR OF NIMP)

CHAIR : IONUT ENCULESCU

ELECTRONICS

09:15 - 09:45

Rodrigo MARTINS

"Exploiting Paper as Active Component in Novel Transistor Architectures"

09:45 - 10:15

Elvira FORTUNATO

"Why metal oxide nanoparticles are so interesting?"

10:15 - 10:30

Radu DRAGOMIR

"Selective exchange effects in single-Mn doped quantum dots"

10:30 - 10:45

Camelia FLORICA

"High performance field effect transistors based on single ZnO nanowires"

10:45 - 11:00

COFFEE BREAK

CHAIR : Cristian Mihail TEODORESCU

ULTRA-THIN and 2D

11:00 - 11:30

Nick BARRETT

"Electron spectromicroscopy of ferroelectric oxides"

11:30 - 12:00

Martin ALEXE

"Topological structures and toroidal ferroelectricity in ultra-thin films and devices"

12:00 - 12:30

Silvano LIZZIT

"Synchrotron radiation photoemission and photoelectron diffraction: the 2D materials case"

12:30 - 12:55

Angelo AGOSTINO

"Synchrotron light for material characterization and modification in the frameworks of international projects"

12:55 - 13:10

Laura ABRAMIUC

"Photoelectron spectromicroscopy of Pb(Zr,Ti)O₃(001) and (111) surfaces"

13:10 - 14:30

LUNCH

CHAIR : Ioana PINTILIE

ENERGY

14:30 - 15:00

Thomas RATH

"Research on Emerging Materials for Hybrid Photovoltaics at Graz University of Technology"

15:00 - 15:30

Alexandru NEMNES

"Ab initio calculations of the band alignment in halide perovskite solar cells"

15:30 - 16:00

Daniel VIZMAN

"New trends in directional solidification of multicrystalline silicon for photovoltaic applications"

16:00 - 16:15

Cristina BESLEAGA-STAN

"Stability in perovskite solar cells"

16:15 - 16:30

Neculai PLUGARU

"Atomistic simulations of methylammonium lead halide layers on PbTiO₃ (001) surfaces"

16:30 - 16:45	COFFEE BREAK
16:45 - 18:00	ROUND TABLE <i>EU priorities in materials research (co-chairs Rodrigo Martins, Elvira Fortunato)</i>
19:00 - 22:00	DINNER

24TH OF MAY **2016**

CHAIR : Aurelian-Catalin GALCA **FUNCTIONALITIES**

09:00 - 09:30	Guns RIJNDERS <i>"Long range symmetry propagation initiated at heterostructure interfaces"</i>
09:30 - 10:00	Viorol POP <i>"Hard Magnetic Materials with Reduced Rare-Earth Content"</i>
10:00 - 10:15	Andra-Georgia BONI <i>"Influence of interlayer type on ferroelectric/dielectric characteristics of multilayered structures"</i>
10:15 - 10:30	Ion IVAN <i>"AC driven magnetic flux quanta in YBCO composite thin films with complex pinning structures"</i>
10:30 - 11:00	COFFEE BREAK

CHAIR : Mariana STEFAN **LARGE INFRASTRUCTURES**

11:00 - 11:30	Jana KOLAR <i>"CERIC-ERIC - European Research Infrastructure Consortia and Materials Science in Central East Europe"</i>
11:30 - 12:00	Primož ŠKET <i>"SLONMR: From small organic compounds to macromolecules"</i>
12:00 - 12:30	Marek STANKIEWICZ <i>"SOLARIS - new synchrotron light source in Europe"</i>
12:30 - 12:45	Nicoleta APOSTOL <i>"Chemistry of carbon and carbon monoxide on Pb(Zr,Ti)O₃(001) surfaces"</i>
12:45 - 13:00	Raluca NEGREA <i>"Electron microscopy at NIMP: capabilities and collaboration opportunities"</i>
13:00 - 13:20	<i>Presentation from Carl-Zeiss</i>
13:20 - 14:45	LUNCH

CHAIR : Victor KUNCSEK **MATERIALS FOR LIFE SCIENCES, CATALYSIS**

14:45 - 15:15	Mangala SRINIVAS <i>"Nanoparticles for multimodal clinical and preclinical in vivo imaging"</i>
15:15 - 15:45	Nicoleta LUPU <i>"Low T_c Glassy Magnetic Alloys for Medical Applications"</i>
15:45 - 16:15	Vladimir MATOLIN <i>"Thin film catalysts for fuel cell technology"</i>

	George STAN
16:15 - 16:30	<i>Dental implant fixtures bio-functionalized with mechanically resistant and cytocompatible bioglass coatings by magnetron sputtering technique</i>
	Ovidiu CRISAN
16:30 - 16:45	<i>Nanoparticles and nanoclusters versatile synthesis methods: pathway towards integrated devices for nanosensing and biomedical applications</i>
16:45 - 17:00	COFFEE BREAK
17:00 - 17:45	<i>How to write a successful application (ERC, Horizon 2020)?</i>
19:00 - 22:00	<i>Dinner sponsored by Carl-Zeiss</i>

25TH OF MAY

2016

CHAIR : Mircea BAIBARAC

CARBON AND NANO

	Mircea DRAGOMAN
09:00 - 09:30	<i>Beyond graphene: hundreds of atomically thin materials</i>
	Magdalena TITIRICI
09:30 - 10:00	<i>Sustainable Carbon Materials and Chemicals from Biomass Hydrothermal Processes</i>
	Adelina MATEA
10:00 - 10:15	<i>Anti-Stokes Raman spectroscopy as a method to identify metallic and mixed metallic/semiconducting configurations of multi-walled carbon nanotubes</i>
	Ana Maria LEPADATU
10:15 - 10:30	<i>Morphology-driven charge storage properties of trilayer structures with Ge nanocrystals in HfO_2</i>
	Russell BINIONS
10:30 - 11:00	<i>Functional metal oxide thin films from electric field assisted aerosol assisted chemical vapour deposition</i>
11:00 - 11:30	COFFEE BREAK

CHAIR : Lucian PINTILIE

FUNCTIONALITIES

	Steve DUNN
11:30 - 12:00	<i>Photoinduced carrier dynamics – the ferroelectric dipole's influence on recombination</i>
	Mihai GIRTU
12:00 - 12:30	<i>Research in Materials Physics at Ovidius University of Constanta</i>
	Augusto Claudio MARCELLI
12:30 - 12:55	<i>Nanoscale phase separation in quantum materials</i>
	Iosif-Daniel SIMANDAN
12:55 - 13:10	<i>Photoexpansion in α-As_2S_3: a possible new mechanism</i>
	Cristian SIMION
13:10 - 13:25	<i>Transducing mechanism of ammonia detection using $BaSrTiO_3$</i>
13:25 - 13:30	CLOSING
13:30 - 15:00	LUNCH



Prof. Rodrigo Martins, presedintele Senatului E-MRS



8. Aprecieri asupra derulării programului și propuneri:

Actualul Program Nucleu, cu cele 3 proiecte componente, se deruleaza pe o perioada de numai 2 ani, respectiv 2016-2017. In anul 2016 au fost derulate, realizate si finalizate 43 de faze de executie: 13 in cadrul proiectului 1; 20 in cadrul proiectului 2; 10 in cadrul proiectului 3. De la inceput, cele 3 proiecte componente ale programului Nucleu „**Multidisciplinaritate si Sinergie in Domeniul Fizicii Starii Condensate si al Materialelor Functionale (MS-FISCOMAT)**” au fost gandite ca fiind interconectate in sensul ca, in cadrul proiectului 1, cercetarile au un caracter mai fundamental, fiind dedicate cu precadere intelegerii fenomenelor fizice care au loc in materia condensata, modelarii si simularii lor, in cadrul proiectului 2 efortul a fost focalizate pe sinteza si caracterizarea de noi materiale si structuri cu potential aplicativ, in timp de proiectul 3 este dedicat dezvoltarii de aplicatii, fie ca este vorba de noi echipamente fie de produse/tehnologii de tip demonstrator de laborator dezvoltate pe baza rezultatelor obtinute in cadrul proiectelor 1 si 2.

Printre rezultatele deosebite obtinute in anul 2016 se pot aminti:

- Dezvoltarea de modele teoretice pentru materiale 2D (ex. fosforena), dar si pentru interfete in heterostructuri care includ materiale polare (ex. feroelectrici).
- Studiul corelatiilor electronice si de spin in materiale si structuri magnetice sau supraconductoare
- Studiul fenomenelor fizice care au loc la interfete biologice si elaborarea de simulari pentru metode neconventionale de tratament precum hiper-termia magnetica
- Sinteza si caracterizarea unui numar impresionant de materiale si heterostructuri cu potential aplicativ: nanofire din ZnO; structuri complexe feroelectric-feromagnetic; materiale cu proprietati magnetice sau supraconductoare; straturi subtiri din materiale biocompatibile; materiale 2D si nanostructuri din materiale cu proprietati semiconductoare; materiale cu proprietati optice imbunatatite, etc. Acestea pot fi utilizate in microelectronica (memorii nevolatile, tranzistoare cu efect de camp), senzori (temperatura, lumina, radiatii), implanturi medicale, surse regenerabile de energie (celule solare). In unele cazuri cercetarile au mers pana la stadiul de demonstrator al functionalitatii sau aplicatiei (ex. celule solare cu materiale care produc up or down conversion; detectori piroelectrici; demonstrarea functiei de memorie; tranzistor cu efect de camp pe baza de nanofir ZnO, etc.).
- Realizarea unor echipamente noi pentru tratamente rapide si pentru caracterizare de suprafata.
- Elaborarea unei metode noi de investigare a proprietatilor superficiale ale feroelectricilor, bazata pe prelucrarea speciala a figurilor LEED, metoda prin care se poate estima grosimea stratului mort in feroelectrici si constanta sa dielectrica.
- Optimizarea unor tehnologii de preparare si procesare pentru materiale cu inalt potential aplicativ in telecomunicatii fara fir, implantologie, senzoristica, etc. cu identificarea valorilor optime pentru parametrii de control ai tehnologiilor respective.

Este remarcabil faptul ca rezultatele actualului program Nucleu, coroborate cu cele obtinute in cadrul Nucleului anterior, au stat la baza fundamentarii unui numar impresionant de aplicatii de proiecte la toate competitiiile organizate pe parcursul anului 2016, atat nationale cat si internationale. Astfel, au fost propuse un numar de aproape 100 de proiecte la competitii PN3 sau Europene. Cea mai importanta aplicatie esta cea depusa in cadrul Horizont 2020, respectiv aplicatia de tip Teaming prin care INCDFM incearca sa dezvolte un centru de excelenta in cercetare si transfer tehnologic in colaborare cu 3 prestigioase institutii din strainatate si anume: Institutul Fraunhofer pentru Automatizari si Ingineria Productiei din Stuttgart, Germania; Universitatea din Twente, Olanda; C-ERIC, infrastructura paneuropeana distribuita cu sediul la Trieste, Italia. Mai jos este confirmarea depunerii proiectului.

Europa / Research / Participant Portal notification

Dear Proposal Participant,

The following proposal has been submitted to the Participant Portal Submission System:

Submitted by : Lucian PINTILIE (pintilie@infim.ro)

Proposal acronym : RO-FUNMAT

Proposal ID : 763628 (internal reference number: SEP-210398986)
Call : H2020-WIDESPREAD-04-2017-TeamingPhase1
Type of action : CSA
Topic : WIDESPREAD-04-2017
Call closure : 2016-11-15 17:00:00
Date of submission : 2016-11-15 07:51:41

Avand in vedere rezultatele produse in 2016 (de remarcat numarul semnificativ de lucrari in jurnale cu scor relativ de influenta ridicat), precum si celelalte rezultate materializate prin cereri de brevet, echipamente realizate, metode noi sau imbunatatite, studii, documentatii, materiale produse prin tehnologii noi sau optimizate, etc. apreciem ca programul Nucleu isi produce efectele si obiectivele prevazute pentru acest an au fost atinse. Gradul de indeplinire a indicatorilor materiali este in majoritatea cazurilor mai mare de 50 % si nu se intrevad probleme care sa puna sub semnul intrebării realizarea acestor indicatori pana la finalizarea celor 3 proiecte in decembrie 2017. Consideram deci ca programul Nucleu actual trebuie continuat si in 2017, acesta fiind elementul esential pentru realizarea misiunii strategice a INCDFM asa cum este ea stabilita prrin aceteele constitutive ale Institutului.

Trebuie subliniat faptul ca programul Nucleu pentru 2017 va capata o noua dimensiune prin includerea unui proiect care sa vitalizeze activitatea noului **Centrul Internațional pentru Pregătire Avansată și Cercetare în Fizică (CIFRA)**, centru constituit ca institut UNESCO de categoria a 2-a sub forma unei unitati cu personalitate juridical in cadrul INCDFM in conformitate cu HG 1006/2016 si HG 847/2013. Noul proiect se poate constitui din faze aferente proiectelor deja evaluate sau ca proiect nou. In orice caz, proiectul va fi dedicate majoritar modelarii si simularii proceselor fizice in materia condensate cu accent pe interfete, interactia materiei cu diferite tipuri de radiatii si corelatii electronice/transport in sisteme magnetice.

Actualul program Nucleu este in sa prea scurt pentru a permite implementarea cu succes a programului de dezvoltare al INCDFM pe directiile de cercetare considerate ca strategice pentru institut, precum si pentru intarirea activitatilor inovatoare si de transfer tehnologic. Desfasurarea activitatilor de cercetare care sa permita atingerea unui nivel de maturitate a produsului/tehnologiei de nivel TRL 4-6 necesita in general in jur de 5 ani. Planul de dezvoltare al INCDFM este de asemenea realizat pentru perioade de 4-5 ani. Ca urmare ar fi benefica dimensionarea programelor Nucleu pe perioade de timp similare, respectiv 4-5 ani, pentru a putea oferi INCD-urilor sansa de a transpune in practica planurile de dezvoltare si de a produce plus-valoarea necesara unei dezvoltari sustenabile si durabile, precum si pentru cresterea impactului pe care INCD-urile le au in viata economica (prin strangerea relatiilor cu mediul privat) si sociala (prin instruire de inalt nivel si generare de locuri de munca).

DIRECTOR GENERAL,

Dr. Ionut Enculescu
Nume și Prenume
Semnătura

DIRECTOR DE PROGRAM,

Dr. Lucian Pintilie
Nume și Prenume
Semnătura

DIRECTOR ECONOMIC,

Ec. Gabriela Ivanus
Nume și Prenume
Semnătura