

Contractor : INCDFizica Materialelor
Cod fiscal: RO9068280

RAPORT ANUAL DE ACTIVITATE
privind desfășurarea programului nucleu
Cercetari teoretice si experimentale in domeniul materialelor multifunctionale avansate
pentru competitivitate economica si dezvoltare durabila (TEXMAV); PN19-03010
(denumire, acronim, cod)
anul 2019

Durata programului: 4 ani

Data începerii: 2019

Data finalizării: 2020

1. Scopul programului:

Obiectivul principal:

Desfasurarea de cercetari teoretice si experimentale in domeniul fizicii starii condensate, al materialelor multifunctionale avansate, si al altor domenii conexe din fizica, cu accent pe sisteme nano-dimensionale, suprafete si interfete, cu potential de aplicatii in domenii de inalta tehnologie, pentru cresterea competitivitatii economice si dezvoltare durabila.

Programul propus pentru perioada 2019-2022 continua directiile de cercetare deschise prin programul desfasurat in anul 2018, incercand o apropiere si mai mare de specializarile inteligente si domeniile de interes national prevazute in Strategia Nationala CDI 2014-2020. In plus fata de programul Nucleu precedent, noul program isi propune sa aduca o crestere si mai accentuata 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.

In definirea principalelor directii tematice din aceasta strategie s-a tinut cont de:

- Strategia Nationala CDI 2014-2020, care focalizeaza cercetarile pe 4 domenii de specializare inteligenta si pe 4 domenii de interes national (Bio-economie; TIC, spatiu si securitate; Eco-nano tehnologii si materiale avansate; Energie, mediu si schimbari climatice; Sanatate; Patrimoniu cultural; Tehnologii noi si emrgente; Cercetare fundamentala si de frontiera). INCDFM poate contribui la toate acestea prin dezvoltarea de materiale avansate si de metode specifice de investigare si analiza.
- Tendintele tematice din ultimii 5 ani, care au reliefat un interes din ce in ce mai accentuat catre directii noi de cercetare, legate in special de sanatate, calitatea vietii si a mediului, resurse energetice regenerabile, tehnologii pentru dezvoltare durabila, materiale pentru aplicatii in conditii extreme de lucru

Structurarea directiilor strategice de cercetare ia in considerare faptul ca cercetarea fundamentala este cea care sta la baza progresului, indiferente daca este vorba de cunoastere sau de tehnologie. Nu se poate imagina progres economic si social fara o componenta puternica de cercetare fundamentala care sa ofere solutii noi la provocarile prezentului si viitorului apropiat. Cercetarea fundamentala imbina modelari si simulari teoretice cu cercetare experimentală pentru verificarea teoriilor si demonstrarea viabilitatii noilor solutii, in cazul de fata in

domeniul materialelor avansate functionale si a metodelor specifice de investigare. Rezultatele vor fi apoi valorificate in cercetari aplicative si dezvoltari experimentale, mergand pana la producerea de modele experimentale, prototipuri si chiar transfer tehnologica catre mediul privat. Ca urmare, au fost propuse urmatoarele directii tematice/obiective specifice de cercetare pentru perioada 2018-2020:

Tematica 1- Cercetari fundamentale la frontiera cunoasterii in fizica starii condensate si a materialelor avansate (in relatie cu domeniul Cercetare Fundamentala din SN-CDI), corelat si cu formare profesionala avansata in fizica si domenii conexe

Cuprinde partea de cercetare fundamentala, modelare, simulare teoretica, validare de concepte si idei prin experimente dedicate (fenomene la scala nano in materiale feroice, materiale 2D, fenomene optice neliniare, fizica suprafetelor si interfetelor, defecte structurale si simularea impactului lor asupra fenomenelor fizice, etc.). Rezultatele vor constitui baza de cunoastere utila pentru Tematica 2, in primul rand, ajutand la proiectarea si realizarea de noi materiale si structuri functionale, dar si pentru Tematicile 3 si 4, orientate catre aplicatii mai punctuale in domeniile de specializare inteligenta carora le sunt adresate. In cadrul acestei tematici sunt incluse si activitatile de formare profesionala pentru tineri cercetatori, formarea profesionala continua pentru cercetatori cu experienta, precum si activitatile de atragere a unor cercetatori de valoare din strainatate sa vina si sa lucreze in INCDFM si a CIFRA.

Tematica 2-Cercetari privind prepararea, caracterizarea si optimizarea materialelor multifunctionale avansate (in relatie cu domeniul de specializare inteligenta „Eco-nanotehnologii si Materiale Avansate”)

Cuprinde totalitatea cercetarilor pentru dezvoltarea de materiale avansate, respectiv metode ecologice de preparare, caracterizare structurala avansata, investigarea proprietatilor fizice si a potentialului de aplicatii. Materialele preparate si investigate in aceasta directie vor alimenta in continuare aplicatiile dezvoltate in cadrul Tematicilor 3 si 4, dupa ce se stabileste care este potentialul pentru aplicatii si nisa din economie care ofera o valorificare maximala a rezultatelor cercetarii.

Tematica 3-Materiale, structuri si metode cu potential de aplicatii in stiintele vietii (in relatie cu domeniile de specializare inteligenta Bioeconomie si Sanatate)

Cuprinde cercetarea pe partea de materiale si metode cu utilitate in Bioeconomie (bio-senzori, procesarea catalitica a deseurilor organice, monitorizarea calitatii alimentelor, metode moderne de conservare a alimentelor, metode si dispozitive de combatere a daunatorilor) si Sanatate (materiale biocompatibile, metode si materiale pentru livrarea tinta a medicamentelor, metode si materiale noi pentru terapie neinvaziva, metode aplicate in industria medicamentului, etc.)

Tematica 4-Cercetari aplicative si dezvoltari experimentale in domeniul materialelor functionale pentru aplicatii de inalta tehnologie (in relatie cu domeniile „Tehnologii Emergente”, „TIC, Spatiu si Securitate”, „Energie, Mediu si Schimbări Climatice” si „Patrimoniu cultural”)

Cuprinde, in principal, cercetare aplicativa si dezvoltare experimentală in domeniul tehnologiilor inovative si al materialelor/structurilor multifunctionale cu potential de aplicatii in domenii de inalta si foarte inalta tehnologie cum sunt TIC, spatiu si securitate (diverse dispozitive electronice, dispozitive de memorare a informatiei, comunicatii fara fir sau prin metode optice, senzorisitica pentru automatizari si monitorizarea diferitelor elemente cu impact asupra confortului si sigurantei personale, etc.), energie (cu aspecte legate de surse regenerabile de energie, stocare, transport si economisire) sau mediu (monitorizarea poluarii, eliminarea sau reciclarea poluantilor, eliminarea gazelor cu efect de sera si altele similare). In ceea ce priveste patrimoniu cultural, se au in vedere atat material care sa securizeze bunurile de patrimoniu cat si metode inovative de analiza a materialelor componente.

Domeniile de specializare inteligenta si domeniile de interes national la implementarea si progresul carora Programul Nucleu al INCDFM poate aduce contributii esentiale:

- **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 in cercetarea pe cateva directii principale: 1) miniaturizarea anumitor componente electronice 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 a materialelor 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 COMUNICAȚILOR, SPAȚIU ȘI SECURITATE**
Si la aceasta specializare inteligenta INCDFM isi poate aduce contributia dezvoltand materiale si aplicatii pentru comunicatii fara fir in special in cazul tehnologiilor bazate pe microunde, pentru prelucrarea si stocarea informatiei (memorii nevolatile), pentru diferite tipuri de senzori utilizabili in aplicatii de securitate (in special in domeniul CBRNE detectie de substante interzise, protectie de perimetre, etc.) sau de spatiu (ex. detectie de IR, microunde, etc.)
- **ENERGIE, MEDIU ȘI SCHIMBĂRI CLIMATICE**
Este un domeniu relansat in INCDFM in ultimii ani. Se pot aduce contributii 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 monitorizarea 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 si intentia ferma de a continua dezvoltarea 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. Cercetarile dezvoltate in institut acopera componente importante din domeniul materialelor cu aplicatii in sanatate, incluzand dezvoltarea de materiale biocompatibile si de metode de fabricare a acestora pentru implanturi si proteze, materiale micro si nanostructurate pentru pansamente inteligente, materiale pentru biosenzori purtabili folositi pentru monitorizarea starii de sanatate. 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 va 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 va contribui cu cercetari privind obtinerea unor materiale pentru acoperiri optice rezistente la fluxuri intense de radiatie laser, sau la realizarea de tinte pentru experimentele avute in vedere in cartea alba a ELI-NP. De asemenea INCDFM va 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 a materialelor utilizand radiatia sincrotron (ELETTRA, C-ERIC), sau la efectele pe care

le are iradierea cu diferite tipuri de radiatie (incluzand radiatiile ionizante) asupra materialelor cu impact tehnologic in diferite sectoare industriale.

- **CERCETARE FUNDAMENTALA SI DE FRONTIERA**

Este un domeniu prioritar la nivel national care intersecteaza 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. Si aici INCDFM poate aduce contributii determinante in intelegerea fenomenelor fizice la nano-scala, la nivelul suprafetelor (cataliza si foto-cataliza) sau al interfetelor (proprietati derivate din imparitate de sarcina la interfete, inginerie de stress 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 mari sau mici).

INCDFM poate aduce contributii si la specializarile inteligente BIOECONOMIE (dezvoltarea de materiale pentru ambalarea produselor, teste de calitate, bio-senzori, etc.) si PATRIMONIUL CULTURAL (analize compositionale, metode nedistructive de datare, etc.)

In afara de contributia esentiala la implementarea Strategiei Nationale CDI 2014-2020, Programul Nucleu poate aduce contributii importante si la alte strategii sau programe nationale sau internationale, dupa cum urmeaza:

(a) STRATEGIA NAȚIONALĂ PENTRU COMPETITIVITATE 2014 – 2020, prin elaborarea de noi concepte, identificarea si studierea de noi fenomene, culminand cu proiectarea de materiale si structuri functionale cu potential de aplicare in industrii cu valoare adaugata ridicata, cum ar fi electronica, energetica, transporturi (auto, feroviare, aeronautica), echipamente medicale, sisteme de securitate, aplicatii spatiale sau militare, etc.

(b) Strategia Regionala de Inovare Bucuresti-Ilfov. Aceasta regiune este singura euro-regiune dezvoltata din România, cu un PIB/locuitor situat la 131 % din media UE (comunicat Agerpres, 9 decembrie 2015), depasind alte capitale din Europa dezvoltata, cum ar fi Berlin sau Madrid. In regiunea Bucuresti-Ilfov sunt localizate majoritatea firmelor ITC de renume, precum si multe din companiile producatoare de componente electronice/optoelectrice, senzori, automatizari, echipamente de transport. Constituie un cert avantaj pentru integrarea activitatii CDI cu activitatea industrială de înalta tehnicitate faptul ca INCDFM se afla localizat in aceasta regiune, dimpreuna cu tendinta afirmata in mod repetat de autoritati de a crea la Magurele un pol european de înalta tehnologie, dupa modelele Adlershof, Jülich sau Karlsruhe (Germania), Orsay-Saclay-Palaiseau sau Villeurbaine (Franta), Tor Vergata – Frascati (Italia) sau Cantoblanco (Madrid). In acest context INCDFM este partener in proiectul Magurele Science Park dezvoltat de autoritatile locale si judetene in aceasta regiune.

(c) Strategiile Regionale de Inovare Sud-Muntenia si Sud-Oltenia. O parte din rezultate obtinute in cadrul cercetarii din INCDFM au aplicativitate in industria auto, ori in aceste regiuni se afla localizate companiile Dacia-Renault, cel mai mare producator auto din tara, precum si Ford Craiova, companie care se presupune ca va trebui sa-si sustina un program CDI ambitios pentru a tine pasul cu principalul competitor la nivel national.

(d) Strategia națională pentru dezvoltare regională 2014 – 2020. In afara faptului ca INCDFM are sansa de a fi situat intr-una din cele mai dezvoltate regiuni ale Europei, legatura cu actori economici din zone mai putin dezvoltate nu este deloc de neglijat, intrucat noi domenii emergente cu valoare adaugata ridicata pot fi dezvoltate incepand cu aceste regiuni. Prin dezvoltarea de materiale inteligente cu aplicativitate in domenii dintre cele mai variate, programul Nucleu produce rezultate de interes pentru IMM-uri din toata tara, inclusiv prin punerea la dispozitie de instrumente de diagnoza in domeniul forestier, minier, turistic sau al agriculturii (senzori de umiditate, detectie de nivel de poluare, diagnoza cladirilor etc.).

(e) Strategii/planuri de mobilitate urbana. Rezultatele cercetarilor din INCDFM pot contribui la dezvoltarea unor elemente de automatizare, monitorizare si control a traficului urban, precum si de monitorizare a noxelor rezultate din traficul auto. Se au in vedere si aplicatii utile in mobilitatea electrica (baterii, acumulatori, noi surse de generare nepoluanta a energiei). De asemenea, noi concepte de diagnoza a microfisurilor din carosabil sau a proceselor de imbatranire in materialele folosite pentru caile de transport pot conduce la un mod mai economic de selectare a acestor materiale si o crestere a duratei de operare.

(f) Orasul inteligent. Conceptul de „Oras Inteligent” presupune un inalt grad de monitorizare a diferitilor parametrii specifici unei aglomerari urbane, cu interconectari si automatizari care necesita senzori, electronica, comunicatii. In cadrul programului se vor dezvolta materiale cu aplicativitate in acest domeniu, cu precadere monitorizare noxe, conditii de iluminat stradal inteligent, conditii de trafic, imbunatatirea eficientei energetice a cladirilor, ecranarea termica a cladirilor cuplata cu generatori solari, etc. De mentionat, de asemenea, ca modele teoretice de transport pe retea (in care in INCDFM exista o certa expertiza) isi pot gasi aplicabilitate in elaborarea de concepte pentru optimizarea traficului in marile aglomerari urbane (de exemplu, decalarea programelor de lucru in diverse intreprinderi sau scoli pentru evitarea ambuteiajelor, programarea lucrarilor de reabilitare, organizarea de manifestari urbane etc.).

(g) Strategia energetica a Romaniei. Se vor dezvolta materiale utile in producerea nepoluanta de energie (conversie fotovoltaica, generatori eolieni, fuziune nucleara-ITER), precum si pentru stocarea energiei (super-capacitori si baterii).

(h) Strategia pentru dezvoltarea sectorului agroalimentar pe termen mediu și lung orizont 2020-2030. Aceste aspecte s-au discutat si la punctul (d). Vor fi dezvoltate materiale inteligente pentru combaterea daunatorilor, rationalizand in acest fel consumul de pesticide si ierbicide, ceea ce va contribui la productia de alimente ecologice; materiale pentru diferite tipuri de senzori ce monitorizeaza calitatea produselor; senzori pentru monitorizarea si prevenirea poluarii, senzori de presiune, umiditate, temperatura, compozitie atmosferica. De exemplu, in anul 2015, Romania s-a clasat pe locul 4 in lume privind exportul de vinuri; este de netagaduit rolul pe care l-ar putea avea metodele avansate de investigatii compozitionale si moleculare din INCDFM in standardizarea unor metode de selectie si de certificare a acestor produse.

(i) Strategia Națională de Sănătate 2014-2020. Obiectivele INCDFM sunt bine încadrate în Strategia Nationala de Sanatate (SNS), in principal prin producerea de materiale si senzori pentru reducerea morbiditatii si mortalității bolilor transmisibile si netransmisibile, a impactului asupra indivizilor si societatii. Acordarea accesului echitabil la serviciile de sanatate, de buna calitate si un bun raport cost-calitate este un alt obiectiv al SNS la care INCDFM, prin promovarea de prototipuri de instrumente de diagnoza de buna calitate si de cost redus, ar putea contribui, contribuind totodata la reducerea importurilor din acest domeniu mare consumator de resurse financiare ale statului. Senzori purtabili care sa monitorizeze continuu parametri legati de starea de sanatate, in special pentru categoriile expuse cum ar fi batrani sau bolnavi cronici pot duce atat la scaderea cheltuielilor de sanatate dar si la cresterea standardului de calitate a vietii.

(j) Planul National de Cercetare-Dezvoltare si Inovare PN III. In legatura cu aceasta, trebuie mentionat ca o cercetare prealabila, de preferinta in cadrul unei Etape a Programului Nucleu este o conditie *sine qua non* pentru conceperea unui proiect PN III de buna calitate. Nu este suficienta cercetarea bibliografica pentru a se identifica stadiul problemei la nivel national si international; din nefericire, experienta a aratat ca in multe cazuri nu ne putem baza in exclusivitate pe raportari preliminare, chiar si ale unor grupuri recunoscute sau publicate in reviste foarte serioase. De multe ori, antamarea experimentelor ofera surprize fie si numai in a reproduce rezultate raportate in lucrari din fluxul interational de cunostinte. Este de dorit ca orice proiect PN III, in special acelea de tip Parteneriat sau PCCF, sa aiba la baza un minim set de investigatii preliminare, realizate cu mijloacele institutului, pentru a se testa in ce mod aceste cercetari pot fi continuate cu succes maxim spre implementarea de aplicatii.

(k) Facilitatea europeana ELI-NP. Se anticipeaza ca INCDFM va fi principala organizatie de cercetare apelata sa ofere solutii la problemele legate de materiale pentru laser, optica, caracterizarea componentelor supuse

fluxurilor mari de iradiere, aplicatii in domeniul dezvoltarii de metode pentru studiul suprafetelor, problematica tintelor ultrasubtiri suto-suportate etc.

(l) Strategia Națională pentru Dezvoltare Durabila a României Orizonturi 2013-2020-2030. Materialele inteligente care pot fi utilizate pentru protectia mediului reprezinta o parte importanta a proiectului propus, fie ca este vorba de senzori specifici pentru monitorizare si metode de detectie dedicate, fie ca este vorba de tehnologii catalitice-fotocatalitice de indepartare a poluantilor din aer, apa si sol. Problematicile mentionate la punctul (d) se aplica si in relatie cu aceasta Strategie.

(m) Rezoluția de admitere a României ca membru cu drepturi depline în Organizația Europeană pentru Cercetare Nucleară (18 iunie 2015). Asocierea Romaniei la CERN va oferi noi oportunitati de dezvoltare de tehnologii emergente pentru detectori de radiatie, senzori de temperatura / presiune / umiditate / camp magnetic pentru circuitele de siguranta etc. Vezi si punctul urmator.

(n) RD50 - Radiation hard semiconductor devices for very high luminosity colliders. Aceasta este o colaborare de lunga durata a INCDFM cu CERN, inceputa cu mult inaintea admiterii României ca membru cu drepturi depline a CERN, institutul coordonand in prezent una din directiile de cercetare (Defect / Material characterization). Creaza premise serioase pentru implementarea la CERN de solutii si concepte dezvoltate in INCDFM.

(o) Infrastructura distribuita C-ERIC (Central European Research Infrastructure Consortium) este un consorțiu de infrastructuri de cercetare din 9 tari Europene, din care INCDFM face parte ca membru fondator. Ea permite caracterizarea la un nivel superior a materialelor sintetizate in INCDFM in cadrul proiectelor componente ale programului Nucleu, prin acces la infrastructuri de cercetare precum radiatia de sincrotron (Elettra Trieste sau Solaris Cracovia, ambele fiind partenri in aceasta organizatie), RMN (Ljubljana) sau surse de neutroni (produsi de reactorul nuclear de la Budapesta).

(p) Programului Horizon 2020. Una dintre prioritatile INCDFM trebuie sa fie si participarea la proiecte internationale. In special prin viitoarele Programe Nucleu se pot genera rezultate la un nivel de la care se pot initia propuneri de proiecte cu sanse de succes in competititiile Europene. Se au in vedere in primul rand proiecte de tip ERA-Chair (o propunere va fi depusa chiar la call-ul actual) sau Teaming, dar si alte tipuri de proiecte (ERC, FET, proiecte conduse de IMM, etc.).

(q) In sfarsit, din nefericire, contextul geopolitic actual, precum si situarea României, din punct de vedere geografic, la periferia Uniunii Europene si in apropierea zonelor de conflict (Orientul Mijlociu si Ucraina) impun noi paradigme de securitate, indiferent daca este vorba de neutralizarea substantelor toxice, detectia contaminantilor de orice natura, monitorizarea traficului fraudulos (de exemplu, detectori de infrarosu ultrasensibili) sau chiar aplicatii militare, in domeniul rachetelor sau apararii antiaeriene. In trecut, INCDFM a avut colaborari intense in domeniul aplicatiilor militare si este posibil ca aceste activitati sa fie reluate, in masura in care industria militara autohtona va solicita solutii rapide si fiabile pentru imbunatatirea starii de siguranta nationala. In cadrul institutului a fost dezvoltat un laborator de tip criminalistic in parteneriat cu structuri ale Ministerelor Afacerilor Interne din Romania si Bulgaria (SIAS si ISU si omologii bulgari) urmand ca pe viitor sa fie dezvoltate si proceduri specifice in special legate de amenintarile de tip CRBNE.

2. Modul de derulare al programului:

2.1. Descrierea activităților (utilizând și informațiile din rapoartele de fază, Anexa nr. 10)

Mai jos sunt prezentate activitatile (fazele) desfasurate in 2019 pe cele doua proiecte componente. Sunt trecute si fondurile alocate, obiectivele urmarite pentru fiecare faza si rezultatele obtinute.

Nr. Crt.	Cod proiect	Denumirea proiectului /	Valoare proiect /	Termen de încheiere al fazei	Obiective/Rezultate

		Nr. și denumire faze de execuție	Valoare fază de execuție (lei)		
	PN19-030101	Cercetari teoretice si experimentale la frontiera cunoasterii in fizica starii condensate si al materialelor multifunctionale cu impact aplicativ in domenii de inalta tehnologie si stiintele vietii.	25,000,000.00		
1		Investigarea spectro-nanoscopica a suprafetelor feroelectrice	1,000,000.00	3/14/2019	<p>Obiective: Caracterizarea straturilor subțiri feroelectrice și a evoluției lor la variații de temperatură sau adsorbției moleculare prin nano-spectroscopie de fotoelectroni cu rezoluție spațială și unghiulară.</p> <p>Rezultate:</p> <p>a) Determinarea stărilor de polarizare a suprafețelor feroelectrice cu rezoluție nanoscopică.</p> <p>b) Determinarea structurii de benzi în straturile subțiri feroelectrice cu rezoluție nanoscopică.</p> <p>c) Determinarea evoluției caracteristicilor straturilor subțiri feroelectrice în funcție de temperatură, iradiere sau adsorbție de molecule pe suprafață.</p>
2		Materiale termoelectrice nanocompozite pe baza de skutteruditi	900,000.00	3/14/2019	<p>Obiective: Se urmareste obtinerea si studiul unor materiale termoelectrice nano-compozite pe baza de skutteruditi dopati pentru aplicatii in domeniul de temperatura 400-800K.</p> <p>Rezultate:</p> <p>1. Obtinerea si caracterizarea unor materiale nano-compozite formate din skutteruditi de tip n si p si diferite tipuri de pulberi nanometrice (oxizi metalici, boruri sau carburi).</p>

3		Proprietatile optice ale fotorezistului SU8 si modelarea acestora in prezenta nanoparticulelor de carbon	1,000,000.00	4/9/2019	<p>Obiective: i) intelegerea proceselor de fotoluminescenta ale fotorezistului SU8 in absenta si respective in prezenta nanoparticulelor de carbon (de exemplu oxid de grafena redus sau nanotuburi de carbon cu un sigur perete metalice si semiconductoare); ii) studii corelate de spectroscopie Raman si IR privind procesele de reticulare ale fotorezistului SU8 in prezenta nanoparticulelor de carbon si iii) elaborarea mecanismului de reticulare al fotorezistului SU8 in prezenta nanoparticulelor de carbon.</p> <p>Rezultate: demonstrarea abilitatii fotoluminescentei in evaluarea proceselor de reticulare ale fotorezistului SU8, induse termic si respective in prezenta luminii UV in prezenta nanoparticulelor de carbon</p>
4		Controlul proprietăților magnetice și de structură locală ale unor nanoparticule de tip miez-înveliș cu miezul de fier sau oxid de fier prin tratamente termice în atmosferă de hidrogen	1,000,000.00	4/9/2019	<p>Obiective:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Prepararea nanoparticulelor de tip miez-înveliș prin piroliză laser. 2. Efectuarea de tratamente termice în atmosferă de hidrogen la diverse temperaturi. 3. Efectuarea de măsurători de structură locală și magnetice. <p>Rezultate:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Determinarea compoziției de faze și legătura cu proprietățile magnetice. 2. Determinarea structurii locale și înconjurării specifice (prin spectroscopie Mössbauer). 3. Evidențierea influenței tratamentelor de hidrogenare asupra structurii locale și proprietăților magnetice.

5		Studii coloidale ale hidroxiapatitei dopate cu argint și studii de citotoxicitate pe celule procariote.	1,000,000.00	5/9/2019	<p>Obiectiv: Obținerea de materiale AgHAp în soluție cu potențial antimicrobian și evaluarea lor complexă prin măsurători de dispersie dinamică a luminii (DLS), potențial zeta, de ultrasunete, morfo-compoziționale și biologică.</p> <p>Rezultate: Obținerea soluțiilor de hidroxiapatită dopată cu argint (AgHAp); Studii coloidale prin DLS, potențial Zeta și măsurători de ultrasunete ale soluțiilor AgHAp; Studii morfologice și compoziționale ale soluțiilor AgHAp prin SEM și EDS; Studii de citotoxicitate pe celule procariote; O lucrare științifică trimisă spre publicare la un jurnal indexat Web of Science®.</p>
6		Materiale feroelectrice fara plumb crescute epitaxial	1,000,000.00	6/10/2018	<p>Obiectivul etapei: Etapa de fata propune un studiu de materiale feroelectrice fara plumb de calitate epitaxiala realizate pe diferite substraturi prin ablatie laser. Se urmareste un studiu fundamental, ce vizeaza deslusirea fenomenelor si mecanismelor care au loc la nivel atomic care stau la baza controlului unor parametrii de material ce influenteaza proprietatile macroscopice (temperature Curie, constanta dielectrica, polarizare).</p> <p>Rezultate: optimizarea parametrilor de depunere in scopul de a obtine filme subtiri de inalta calitate pe diferite substraturi monocristaline, studiul dependentei proprietatilor la nivel atomic functie de constanta de retea a substratului si analiza efectelor de strain indus de diferenta de constanta de retea dintre substat si materialul feroelectric.</p>
7		Materiale nanocompozite pe bază de derivați de celuloză și particule de carbon pentru obținerea de platforme senzoriale 3D flexibile	1,000,000.00	7/9/2019	<p>Obiectiv: Obținerea de materiale nanocompozite pe bază de derivați de celuloză și particule de carbon pentru obținerea de platforme senzoriale 3D flexibile</p> <p>Rezultate: perfecționarea procedurii de fabricare a unor materiale compozite pe bază de lianți biopolimerici de celuloză și materiale de carbon; electrificarea materialelor compozite pentru obținerea de matrice 3D; caracterizarea morfologică și electrochimică a matricelor 3D pe bază de materiale compozite; testarea matricelor 3D ca platforme senzoriale pentru analiți de interes.</p>

8		a) Depunere si caracterizare a filmelor subtiri pe baza de oxid de hafniu dopat sau nedopat pentru aplicatii electronice	400,000.00	6/14/2019	Obiectiv: In acesta faza propunem optimizarea parametrilor de depunere in vederea obtinerii unor filme subtiri pe baza de oxid de hafniu dopat sau nedopat (ex. Zr:HfO ₂) de calitate ridicata, utilizand metode de depunere fizica din plasma – PVD (pulverizare asistata de magnetron si/sau ablatie cu fascicul laser pulsant). Rezultate: au fost investigate proprietatile dielectrice/feroelectrice ale straturilor de HfO ₂ dopat si evaluata posibilitatea integrarii acestora in heterostructuri complexe de tip MFS sau FET in combinatie cu straturi semiconductoare de oxid complex de indiu, galiu si zinc (IGZO).
9		Noi compusi Heusler. Studiul proprietatilor magnetice si termoelectrice in raport cu structura electronica specifica.	1,000,000	7/12/2019	Studiul structurii electronice, a proprietatilor de transport si a comportamentului magnetic in noi compusi Heusler ternari si quaternari cu posibile aplicatii spintronice si termoelectrice. Rezultate: 1. Obtinerea structurii electronice si a proprietatilor (magnetice si de transport electric/termic) asociate in noi aliaje de tip Heusler in cadrul teoriei Functionalei de Densitate si compararea cu rezultate experimentale.
10		Proprietatile luminescente si magnetice ale materialelor nanostructurate multifunctionale dopate cu pamanturi rare	1,000,000	8/12/2019	Obiective: Studiul materialelor nanostructurate multifunctionale de tip fluoruri/cloruri dopate cu pamanturi rare cu proprietati luminescente pentru aplicatii ca luminofori de "lumina alba", in fotovoltaica sau imagistica medicala. Rezultate: (i) Sinteza fizico-chimica si caracterizarea nanostructurale a nanofosforilor dopate cu pamanturi rare (ii) Caracterizarea proprietatilor luminescente si magnetice
11		Studii spectrale si analiza fenomenelor de interferenta cuantica in sisteme bipartite.	900,000	9/13/2019	Obiectiv: Studiul proprietatilor spectrale si al zerourilor conductantei electrice in sisteme bipartite si molecule alternante. Rezultate: i) studiul conditiilor de existenta a zerourilor "grele" in doturi cuantice de grafena si molecule; ii) elaborarea unei teorii generale pentru explicarea anularii transportului electronic in sisteme bipartite legate in serie; iii) calculul si proprietatile functiilor de unda pentru sisteme moleculare cu relevanta pentru transportul cuantic.

12		Fenomene de capacitate negativa in structuri feroelectrice	1,000,000	10/11/2019	<p>Obiectiv: Studiul fenomenului de capacitate negativa in feroelectricsi heterostructuri care includ straturi feroelectrice</p> <p>Rezultate: au fost crescute straturi subtiri feroelectrice in geometrie capacitor, precum si heterostructuri care includ cel putin un strat feroelectric; au fost realizate masuratori specific de histerezis si capacitate. S-a pus in evidenta fenomenul de capacitate negativa ca efect tranzitoriu legat de reversarea polarizarii.</p>
13		Sinteză de nanoparticule încărcate pe suprafețe feroelectrice și studiul in situ al reactivității acestor suprafețe	1,000,000	10/11/2019	<p>Obiective:</p> <p>Se urmareste sinteza de nanoparticule din metale nobile cu proprietati catalitice, pe suprafete feroelectrice si caracterizarea lor complexa, inclusiv in raport cu chimismul specific acestora</p> <p>Rezultate:</p> <p>Obtinerea de probe feroelectrice cu suprafata curata, caracterizarea lor compozițională și din punct de vedere al stării de polarizare prin spectroscopie de fotoelectroni (XPS, UPS), structural, prin difracție de electroni (LEED, RHEED), depunerea de metale nobile cu proprietăți catalitice, caracterizarea stării de încărcare prin XPS și UPS și studiul in situ al adsorbției și desorbției de molecule simple pe aceste suprafețe, prin spectroscopie de fotoelectroni cuplată cu spectrometrie de masă.</p>
14		Dezvoltarea modelului teoretic de conductie pentru filme compacte de oxizi metalici semiconductori cu aplicatii in detectia de gaze.	900,000	11/14/2019	<p>Obiective:</p> <p>Dependenta conductantei de grosimea filmului gaz senzitiv; cazurile particulare ale semiconductoilor de tip n si p in aproximatia Maxwell-Boltzmann.</p> <p>Rezultate:</p> <p>Evolutia conductantei normalizate functie de:</p> <ul style="list-style-type: none"> - lungimea Debye; - grosimea filmului gaz senzitiv; - curbarea de suprafata a bentilor energetice; - temperatura de operare a filmului gaz senzitiv.

15		Studii ale materialelor nanostructurate cu proprietati magnetice dure, obtinute in sisteme fara pamanturi rare	1,000,000	11/14/2019	<p>Obiective:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. elaborarea de strategii de obtinere de faze magnetice dure in materiale magnetice fara pamanturi rare. 2. determinarea parametrilor compozitionali necesari obtinerii de structuri de faze cu anizotropie magnetocristalina ridicata; 3. determinarea parametrilor magnetici (camp coercitiv, magnetizare de saturatie) si corelarea acestora cu rezultatele structurale; <p>Rezultate:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. analiza compozitionala a aliajelor magnetice fara pamanturi rare si modularea stoichiometriei in vederea obtinerii fazelor magnetice de interes. 2. obtinerea parametrilor structurali si de sinteza optimali; analiza microstructurala prin tehnici de difractie de radiatie X si imagistica de electroni; 3. optimizarea parametrilor si a comportamentului magnetic si studiul evolutiei structurii de faze cu temperatura.
16		Termodinamica proceselor de comutare a polarizarii feroelectrice: aplicarea modelului Landau-Ginzburg-Devonshire pentru structuri multistrat cu aplicatii in memorii cu stari multiple	900,000	11/14/2019	<p>Obiective: Realizarea unui model teoretic pentru a descrie curbele de polarizare obtinute experimental pe structuri multistrat cu aplicatii in memorii cu stari multiple. Se urmareste obtinerea calitativa a formei curbelor de histeresis folosind teoria Landau-Ginzburg-Devonshire.</p> <p>Rezultate: a fost determinat impactul diversilor parametri (grosimea straturilor, numarul straturilor, constantele dielectrice etc.) asupra caracteristicilor electrice ale structurilor multistrat.</p>

17		Nanofibre polimerice funcționalizate cu TiO ₂ si ZnO pentru aplicații de fotocataliză	1,000,000	11/14/2019	<p>Obiective</p> <p>Obținerea prin procesul de electrospinning de nanofibre care sa incorporeze nanoparticule de TiO₂ si ZnO; Gasirea concentrațiilor optime de nanoparticule dopante pentru a obtine nanofibre ci proprietati fotocatalitice; Caracterizarea din punct de vedere morfologic, structural si optic a nanofibrelor electrofilate dopate cu TiO₂ si ZnO;</p> <p>Rezultate:</p> <p>obținerea, prin procesul de electrospinning, a unor nanofibre polimerice cu proprietati fotocatalitice prin incorporarea in acestea de nanoparticule de TiO₂ si ZnO. Procesul de fabricare optimizat in functie de concentratia de nanoparticule folosita, pentru proces de fotocataliza eficient.</p>
8		b) Investigare proprietati fizice, inclusive feroelectrice, a filmelor subtiri pe baza de oxid de hafniu dopat sau nedopat pentru aplicatii electronice	500,000.00	12/9/2019	<p>obținerea filmelor subtiri de Al_xHf_{1-x}O₂ si Zr_xHf_{1-x}O₂ prin pulverizare asistata de magnetron si depunere laser pulsata caracterizarea filmelor subtiri de Al_xHf_{1-x}O₂ si Zr_xHf_{1-x}O₂ prin masuratori structurale (XRD, SEM), morfologice (AFM) si optice (elipsometrie spectroscopica) integrarea straturilor subtiri de Al:HfO₂ si Zr:HfO₂ in structuri de tip capacitor si investigarea proprietatilor dielectrice/feroelectrice ale acestora integrarea straturilor subtiri de Al:HfO₂ si/sau Zr:HfO₂ in heterostructuri complexe de tip MFS sau MOS si caracterizarea electrica a acestora</p>
18		Fenomenul de histerezis in celule solare cu perovskiti – studii experimentale si teoretice	1,000,000.00	12/9/2019	<p>Rezultate: i) fabricarea si caracterizarea chimica si structurala a celulelor solare cu perovskiti halogenati; ii) caracterizare electrica si fotoelectrică a acestora, stabilirea dependentei marimii histerezisului atat de caracteristicile intrinseci ale probelor PSC (chimia, structura, geometria si tipul interfetelor cu materialul absorbant de tip halid perovskit) cat si de conditiile de masura (tensiuni maxime aplicate, viteze de variatie a tensiunii in timpul masuratorilor electrice, prezenta sau absenta iluminarii); iii) dezvoltarea unui model dinamic analitic care sa considere fenomenele care apar la nivel microscopic, atat datorita compozitiei si structurii PSC cat si a conditiilor de masura, si care sa descrie cantitativ histerezisul in celulele solare cu perovskiti halogenate (PSC).</p>

19		Competitia dintre localizarea polaronica si conductivitate in oxizi de mangan	1,000,000.00	12/9/2019	stabilirea semnaturii in spectrele de fotoemisie a tranzitiei de la izolator la metal in CCMO in functie de dopajul cu Ce -obtinerea experimentală a legilor de dispersie E(k) pentru LSMO si CCMO in ARPES -identificarea energiilor modurilor de vibratie active in cuplajul electron fonon din legile de dispersie obtinute experimental -modificarea polarizării orbitale si a cuplajului electron fonon in functie de tensiunea indusa de substrat in cresterea epitaxiala
20		Rolul modurilor optice si vibrationale in functionarea unor sisteme hibride cu posibile aplicatii in nanofotonica si metrologie cuantica: abordare teoretica si computationala	900,000.00	12/9/2019	Rezultate: i) obtinerea structurii de stari imbracate (dressed states) pentru modelul Tavis-Cummings generalizat; ii) comparatie cu modelul Rabi cuantic; iii) calculul curentilor dependenti de timp si al corelatiilor acestora in sisteme hibride (comparatie cu metoda ecuatiei de miscare Heisenberg-Langevin); iv) implementarea numerica a ecuatiei Master nemarkoviene pentru sisteme hibride in prezenta unor semnale dependente de timp; v) investigarea dinamicii fotonilor si/sau a modurilor de vibratie; vi) analiza efectelor de interactie si a regimului de cuplaj puternic.
21		Morfologie controlata in materiale compozite	1,000,000.00	12/9/2019	Rezultate: Obtinerea si caracterizarea unor noi materiale compozite cu morfologie prestabilita la nivel micrometric. Evaluarea posibilitatilor de control al proprietatilor rezultate in vederea dezvoltarii de aplicatii.
22		Nanostructuri hibride supraconductor-feromagnet	1,000,000.00	12/9/2019	Rezultate: 1. Evaluarea eficientei nanoparticulelor si/sau nanostraturilor feromagnetice ca centri pinning 2. Identificarea influentei spinilor asupra condensatului si asupra vortexurilor;
23		Studiul proprietatilor fotoelectrice ale filmelor nanocristaline pe baza de aliaje binare din sistemul SiGeSn	1,000,000.00	12/9/2019	Rezultate: - corelarea proprietatilor fotoelectrice cu morfologia filmelor; - filme cu caracteristici optime obtinute prin experiment si modelare
24		Investigații privind efectul alotropilor carbonului asupra agregării proteinelor implicate în declanșarea bolii Alzheimer.	1,000,000.00	12/9/2019	Depunerea de straturi de A β (1-42) din soluție prin metodele Langmuir-Blodgett și drop cast pe substrat de Si; Depunerea de straturi de fulerenă C60 pe substrat de Si; Depunerea de straturi de A β (1-42) din soluție prin metodele Langmuir-Blodgett și drop cast pe substrat de Si acoperit cu C60; Depunerea de straturi de A β (1-42) conținând colesterol din soluție prin

					metodele Langmuir-Blodgett și drop cast pe substrat de Si și Si acoperit cu C60; Caracterizarea straturilor obținute prin metode microscopice și spectroscopice pentru identificarea prezenței structurilor secundare/fibrilare; Evidențierea corelației dintre prezența nanoparticulei și/sau colesterolului și dezvoltarea unei anumit tip de structură în strat;
25		a) Dezvoltarea de metasuprafețe și testarea acestora prin tehnici rezonante de analiză	600,000.00	12/9/2019	Rezultate: Realizarea de metasuprafețe - arii de rezonatori optici cu dimensiuni și distanțe relative între ei mult mai mici decât lungimea de undă de operare; Studii de caracterizare prin spectroscopie (i) de absorbție cu cavitate rezonantă în undă evanescentă, (ii) cu rezonanțe plasmonice de suprafață, și (iii) Raman amplificată de suprafață; Evaluarea metasuprafețelor dezvoltate în scopul creșterii sensibilității unor senzori spectroscopici utilizați pentru detecția de anticorpi, proteine și/sau substanțe pentru terapia oncologică.
26		Studiul efectelor campurilor magnetice variabile și statice asupra reacțiilor fotocatalitice pe suprafața nanoparticulelor de TiO ₂	1,000,000.00	12/9/2019	Rezultate: 1. Obținerea de nanoparticule de TiO ₂ cu activitate fotocatalitică diferită prin hidroliza controlată a alcoxizilor de titan și varierea condițiilor de tratament post-hidroliza; 2. Evaluarea eficienței unor reacții fotocatalitice în prezența campurilor magnetice variabile/statice; 3. Stabilirea implicării speciilor reactive de oxigen prezente în mediul de reacție în mecanismul reacției fotocatalitice în absența/prezența campurilor magnetice externe
	PN19-030102	Dezvoltarea de metode teoretice și numerice avansate și de programe de formare profesională pentru investigarea unor procese din fizică și domenii conexe	469,744.00		

1a		Realizarea unui pachet software performant și multifuncțional pentru analiza datelor multidimensionale rezultate din spectromicroscopie I: realizarea și testarea pachetului software	196,560.00	9/9/2019	Obiective: Pachet de programe pentru analiza cuburilor și hipercuburilor de date de spectro-microscopie Rezultate: a) Realizarea de module pentru analiza rapidă și vizualizarea imediată a spectrelor. b) Realizarea de module pentru vizualizarea imediată a intensităților integrate pe regiuni de interes. c) Realizarea de module de generare de filme din date înregistrate la momente de timp diferite. d) Realizarea de module pentru fitarea automată a datelor experimentale și reprezentarea dependențelor parametrilor de fitare.
1b		Realizarea unui pachet software performant și multifuncțional pentru analiza datelor multidimensionale rezultate din spectromicroscopie I: elaborarea și diseminarea manualului de utilizare”	53,440	11/14/2019	Elaborarea și diseminarea manualului de utilizare a pachetului software performant și multifuncțional pentru analiza datelor multidimensionale rezultate din spectromicroscopie
2a		Pregatiri preliminare ale codului numeric de calcul al factorilor spațiu de fază pentru tranzițiile beta superpermise	122,031	12/9/2019	Pentru atingerea standardelor și incertitudinilor experimentale actuale pentru marimile măsurate în tranzițiile beta superpermise, valoarea factorului spațiu de fază trebuie corectată. Codul numeric de rezolvare al ecuației Dirac trebuie scris astfel încât să cuprindă corecțiile de dimensiune finită a nucleului, de masă finită a nucleului, schimb atomic, ecranare datorată norului electronic atomic și corecții de schimb între electronul (pozitronul) emis și norul electronic atomic. În această etapă ne propunem să introducem toate aceste corecții în codul numeric pentru rezolvarea ecuației Dirac, prin care se poate obține factorul spațiu de fază și să comparăm rezultatele preliminare cu literatura de specialitate.
2b		Estimarea elementului Vud din matricea CKM și	97,713.00	12/9/2019	În această etapă au fost introduse corecții în codul numeric pentru rezolvarea ecuației Dirac, prin care se poate obține factorul spațiu de fază și să comparăm rezultatele preliminare cu literatura de specialitate.
Total program:			25,469,744.00		

2.2. Proiecte contractate:

od obiectiv	Nr. proiecte contractate	Nr. proiecte finalizate	Anul 2019
-------------	--------------------------	-------------------------	-----------

1. PN19-030101	2	0	25,469,744.00
Total:	2	0	25,469,744.00

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

	Anul
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)

Indicatori specifici pentru monitorizare și evaluare (valori minime asumate), așa cum apar în **Anexa 1. la**

Ordinul MCI nr. 924/30.10.2018:

- Studii și documentatii pentru noi tehnologii, echipamente și metode: 4
- Formule, rețete, scheme, produse și tehnologii (la nivel de material, tehnologie sau demonstrator produs în laborator): 30
- Lucrări publicate în jurnale ISI: 500
- Cereri de brevet depuse: 30
- Aplicații de proiecte: 25 (depinde și de ritmicitatea competițiilor)
- Tineri cercetători angajați în institut: 10
- Institutiile colaboratoare din țară și străinătate: 30
- Cercetători din străinătate care vin pentru stagii de lucru în INCDFM: 10
- Firme contactate pentru valorificarea rezultatelor: 30 (domenii: electronica; auto; IT; securitate; energetica; echipamente și automatizări; medicina; protecția mediului)
- Prezentări la conferințe: 300

Indicator	Valoare asumată la final Program Nucleu (2022)	Valoare realizată în 2019 (primul an)	Grad de realizare (%)	Observații/Detalii
<u>Studii și documentatii pentru noi tehnologii, echipamente și metode</u>	4	2	50	Fazele 5 și 15 din schema de realizare
<u>Formule, rețete, scheme, produse și tehnologii (la nivel de material, tehnologie sau demonstrator produs în laborator)</u>	30	9	30	Fazele 2, 6, 7, 8, 9, 13, 17, 22, 1a din schema de realizare
<u>Lucrări publicate în jurnale ISI</u>	500	170	34	
<u>Cereri de brevet</u>	30			

<u>depuse</u>				
<u>Aplicatii de proiecte</u>	25	159	636	103 proiecte PED (68 ca institutie coordonatoare); 6 proiecte PTE (parteneri); 23 proiecte PD; 23 proiecte TE; 2 proiecte ERC; 1 proiect CERN; 1 proiecte Norvegia
<u>Tineri cercetatori angajati in institut</u>	10	6	60	Concurs organizat in octombrie 2019
<u>Institutiile colaboratoare din tara si strainatate</u>	30	42	140	7 din strainatate in proiecte H2020; 35 din tara in proiecte PED
<u>Cercetatori din strainatate care vin pentru stagii de lucru in INCDFM</u>	10	12	120	Bursieri AUF
<u>Firme contactate pentru valorificarea rezultatelor</u>	30	17	56.7	Cu 11 au fost incheiate contracte, cu 6 au fost depuse proiecte PTE
<u>Prezentari la conferinte</u>	300	161	63.7	23 invitate; 53 orale; 85 postere

Se poate constata ca indicatorii asumati in propunerea de Program Nucleu transmisa la competitia organizata la inceputul anului 2019 au un grad de indeplinire de cel putin 30 %, in conditiile in care actualul Program Nucleu se intinde pe 4 ani, pana la finalul anului 2022.

Remarcabil este faptul ca unii indicatori au fost consistent depasiti inca din primul an, cum ar fi „Aplicatii de proiecte”, „Institutiile colaboratoare din tara si strainatate” si „Cercetatori din strainatate care vin pentru stagii de lucru in INCDFM”. Printre cauzele care au dus la aceasta situatie putem enumera urmatoarele:

- Competitiile de proiecte organizate in 2019, dupa o pauza de 3 ani. Aceasta lipsa de competitii a dus la depunerea unui numar foarte mare de proiecte, in special la PED si PTE, pentru a se putea asigura o finantare cat de cat decenta in anii urmatoari.
- Proiectele de tip colaborativ cu firme au dus la contactarea unui numar mare de companii pentru a se analiza posibile colaborari in vederea valorificarii rezultatelor obtinute in cadrul Programelor Nucleu anterioare, sau al Programului Nucleu actual. Merita mentionat faptul ca Programul Nucleu este cand ca un „incubator” pentru noi idei, inclusiv demonstrarea validitatii lor in sistem „proof of concept”. Multe dintre solutiile tehnice propuse firmelor care au depus expresii de interes pentru proiecte de tip POC-G isi au originea in cercetarile efectuate in cadrul Programului Nucleu. Ca urmare, incheiere de contracte subsidiare Poc-G poate fi privita ca o modalitate de valorificare a rezultatelor obtinute in cadrul Nucleului, contractele finantand transferul efectiv de cunoastere de la INCDFM catre firmele partenere, cu scopul declarat de pune in piata noi produse si tehnologii.
- Infrastructura de cercetare variata si moderna atrage un numar din ce in ce mai mare de tineri din tari mai putin dezvoltate pentru a veni sa desfasoare stagii experimentale de practica in INCDFM, mergand pana la a se inscrie la doctorat in tara.

Mai mentionam ca rezultatele prezentate mai sus au fost obtinute in conditiile in care finantarea pentru 2019 a fost sub cea solicitata prin propunerea transmisa (25,469,744.00 lei alocat fata de 32,600,000.00 lei solicitati). Ca urmare, nu toate fazele prevazute in 2019 au putut fi finatate, dar cu toate acestea obiectivele prevazute pentru 2019 au fost indeplinite, toti indicatorii fiind in graficul de realizare.

4. Prezentarea rezultatelor:

4.1. Stadiul de implementare al proiectelor componente

Denumirea proiectului	Tipul rezultatului estimat	Stadiul realizării proiectului
1. Cercetari teoretice si experimentale la frontiera cunoasterii in fizica starii condensate si al materialelor multifunctionale cu impact aplicativ in domenii de inalta tehnologie si stiintele vietii	(studiu proiect, prototip, tehnolog, etc., alte rezultate) 2 studii; 9 formule, retete, materiale; 170 lucrari publicate in jurnale indexate ISI si alte 27 de lucrari in alte publicatii; cereri de brevet si modele de utilitate.	In grafic, grad de realizare estimat la 32 %
2. Dezvoltarea de metode teoretice si numerice avansate si de programe de formare profesionala pentru investigarea unor procese din fizica si domenii conexe	1 produs software; 2 lucrari ISI	In grafic, grad de realizare estimat 30 %

In continuare sunt prezentate, in rezumat, principalele rezultate obtinute la fiecare faza/etapa de realizare din schema de mai sus.

Titlu Fază: Investigarea spectro-nanoscopica a suprafetelor feroelectrice

Termen: 3/14/2019

Obiective: Caracterizarea straturilor subțiri feroelectrice și a evoluției lor la variații de temperatură sau adsorbții moleculare prin nano-spectroscopie de fotoelectroni cu rezoluție spațială și unghiulară. Validarea unei noi metode multi-dimensionale de caracterizare corelată a materialelor feroelectrice din punct de vedere structural, al structurii de domenii, structurii electronice și transferului de sarcină ca urmare a adsorbțiilor moleculare la suprafață.

Rezultate estimate initial:

- Determinarea stărilor de polarizare a suprafețelor feroelectrice cu rezoluție nanoscopică.
- Determinarea structurii de benzi în straturile subțiri feroelectrice cu rezoluție nanoscopică.
- Determinarea evoluției caracteristicilor straturilor subțiri feroelectrice în funcție de temperatură, iradiere sau adsorbție de molecule pe suprafață.

Rezultate obținute (scurtă descriere a celor mai importante rezultate, cu 1-2 imagini/grafice de impact care susțin rezultatele):

Scopul actualului experiment a fost, pe de o parte, investiarea acestor procese cu o rezoluție spațială mai bună (100 nm față de $> 0,6 \mu\text{m}$ în lucrările [1–3]), precum și, mai cu seamă, folosirea rezoluției unghiulare pentru analize mai fine. Pe linia de fascicul Antares de la facilitatea de radiație de sincrotron Soleil de la Saclay (Franța) se pot obține hipercuburi de date (4-dimensionale) ale intensității fotoelectronilor emiși în funcție de cele două coordonate spațiale pe suprafața probei analizată (x și y), unghiul (polar) de emisie θ și, bineînțeles, energia cinetică a fotoelectronilor E_k . Fasciculul de radiație de sincrotron poate fi focalizat folosindu-se plăci zonale Fresnel (Fresnel zone plates) până la dimensiunea spot-ului amintită anterior, 100 nm. Ideea principală a experimentului a fost stabilirea unor hărți ale pozițiilor energiilor de legătură în funcție de x și y ; apoi, pe zone corespunzând unor valori diferite ale componentei perpendiculare pe plan a polarizării, investigarea dependenței

unghiulare a fotoelectronilor emiși, tratarea acestor dependențe printr-un formalism de difracție de fotoelectroni (XPD) [4]; de asemenea, înregistrarea de spectre de fotoelectroni din banda de valență rezolvate unghiular (ARUPS) conducând la determinarea experimentală a structurii de bandă pe regiuni cu polarizare bine definită, adică deducerea legilor de dispersie $E(k_{\parallel})$, k_{\parallel} fiind componenta vectorului de undă al electronilor din banda de valență paralelă cu suprafața.

Ca exemplu, pentru proba de grosime de 200 nm, energiile de legătură Pb 5d_{5/2} nanoscopic au fost 14.17 eV (presupuse regiuni cu polarizare orientată înspre interior P⁽⁻⁾) și 14.93 eV (regiuni unde am presupus polarizarea orientată înspre exterior P⁽⁺⁾). S-au extras atât figurile de difracție XPD, cât și structurile de bandă în mod diferențiat pe regiuni cu energii de legătură Pb 5d diferite. O hartă a energiilor de legătură a maximelor Pb 5d_{5/2} este dată în Fig. 1(a). În Fig. 1(b,c) am reprezentat imaginile de difracție de fotoelectroni obținute în mod diferențiat prin sumarea semnalelor pe regiunile de tip A (minoritare) sau B (majoritare). Se observă că valorile maximelor XPD sunt aceleași, în ciuda diferențelor de energii de legătură, iar tetragonalitatea poate fi calculată în ambele cazuri ca fiind $c/a \approx 1.067$. Aici apare un rezultat surprinzător, în sensul că tetragonalitatea obținută pentru proba mai groasă este mai importantă decât pentru proba mai subțire, unde s-a dedus $c/a \approx 1.058$.

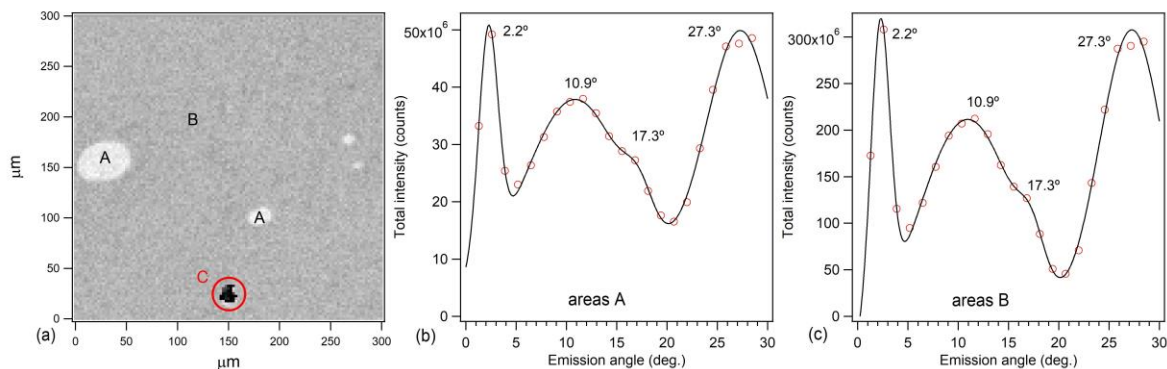


Fig. 1. (a) Harta energiilor de legătură ale maximumului Pb 5d_{5/2} obținute pentru proba de 200 nm PZT(001); (b,c) imagini de difracție de fotoelectroni obținute în mod diferențiat sumând pe regiunile de tip A sau B, identificate în (a).

În final, probele au fost dozate cu apă (absorbant polar) și s-au reluat experimentele, evidențiindu-se deplasări foarte importante, de 6–8 eV pentru proba mai groasă (200 nm). Se poate presupune, de exemplu, că prezența câmpului electric la suprafață disociază molecula de apă, iar electroni, protoni sau radicali OH⁻ migrează înspre interiorul probei, neutralizând stratul de compensare.

Bibliografie:

- [1] D. G. Popescu, M. A. Hușanu, L. Trupină, L. Hrib, L. Pintilie, A. Barinov, S. Lizzit, P. Lacovig, C. M. Teodorescu, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 17, 509–520 (2015).
- [2] M. A. Hușanu, D. G. Popescu, C. A. Tache, N. G. Apostol, A. Barinov, S. Lizzit, P. Lacovig, C. M. Teodorescu, *Appl. Surf. Sci.* 352, 73–81 (2015).
- [3] L. E. Abramiuc, L. C. Tănase, A. Barinov, N. G. Apostol, C. Chirilă, L. Trupină, L. Pintilie, C. M. Teodorescu, *Nanoscale* 9, 11055–11067 (2017).
- [4] A. Pancotti, J. Wang, P. Chen, L. Tortech, C. M. Teodorescu, E. Frantzeskakis, N. Barrett, *Phys. Rev. B* 87, 184116 (2013).

Concluzii și perspective:

S-a realizat caracterizarea completă a interdependenței dintre structură, starea de polarizare și structura electronică în materialele feroelectrice. De asemenea, influența temperaturii și a adsorbției moleculare duc la așteptări considerabile în domeniul proprietăților catalitice și fotocatalitice ale acestor suprafețe. Obținerea deplasărilor semnificative spre energii de legătură mai ridicate după adsorbția apei pe suprafețe pre-polarizate

este un efect extrem de important și care ar putea avea aplicații importante în cataliză, fotocataliză și efecte fotovoltaice.

Continuarea cercetărilor presupune investigarea și a altor probe, cu diferite stări de polarizare, de exemplu pornindu-se de la PZT(001) sintetizat pe substraturi de SrTiO₃ dopat cu Nb (STON), unde polarizarea majoritară ar trebui să fie orientată înspre exteriorul probei, față de cazul PZT sintetizat pe SrRuO₃, unde polarizarea majoritară s-a obținut orientată înspre interior. De asemenea, pentru aplicații domestice ar trebui să se înceapă investigarea materialelor feroelectrice fără Pb, de exemplu a BaTiO₃ sau a LiNbO₃.

Titlu Faza: Materiale termoelectrice nanocompozite pe baza de skutteruditi

Termen: 3/14/2019

Obiective: Se urmareste obtinerea si investigarea proprietatilor unor materiale termoelectrice nano-compozite, fabricate prin incorporarea in matricea unui compus de tip skutterudit dopat a unor nanoparticule, cu scopul de a imbunatati proprietatile termodinamice si mecanice ale acestora, in vederea dezvoltarii, intr-o etapa ulterioara, a unor aplicatii in domeniul de temperatura 400-900K.

Rezultate estimate initial:

Este vizata sinteza skutteruditului dopat cu doua tipuri de atomi, In_{0.2}Yb_{0.2}Co₄Sb₁₂, in stare monofazica si cu stoichiometrie ridicata. Ulterior, in matricea acestuia vor fi incorporate procente diferite de β-SiC nanometric si se va urmări determinarea procentului optim de β-SiC care conduce la maximizarea valorilor figurii de merit, ZT.

Rezultate obtinute (scurta descriere a celor mai importante rezultate, cu 1-2 imagini/grafice de impact care sustin rezultatele):

In general, calitatea unui material termoelectric este caracterizata de o marime adimensionala denumita “figura de merit”, $ZT = (S^2\sigma T)/\kappa$, unde κ este conductivitatea termica, S coeficientul Seebeck iar σ conductivitatea electrica. Cele mai bune materiale termoelectrice au valori ale ZT cuprinse intre 1 si 2,5, problema imbunatatirii acestora reducandu-se la optimizarea marimilor care o definesc, un proces dificil tinand seama de faptul ca ameliorand una dintre ele le va afecta nefavorabil pe celelalte.

Skutteruditi sunt recunoscuti drept materiale cu proprietati termoelectrice excelente intr-un interval de temperatura cuprins intre 400K si 900K. Cel mai cunoscut tip de scuterudit, CoSb₃, are celula unitate formata din 32 de atomi (Co8Sb24) distribuiti intr-un cub in colturile caruia se afla atomi de Co cu sase inele de Sb ocupand 6 cavitati si inca doua cavitati libere in pozitiile (0,0,0) sau (½, ½, ½). Cele doua cavitati libere din celula unitate pot fi ocupate de atomi cu o raza ionica mai mica decat raza acestei cavitati. Vibratiile atomilor din cavitati imprastie modurile fononice acustice conducand astfel la scaderea valorilor conductivitatii termice, κ , efect amplificat de numarul tipurilor distincte de atomi introdusi in cavitati. Din aceste considerente, compusul de baza ales in acest studiu este un skutterudit dublu dopat, respectiv In_{0.2}Yb_{0.2}Co₄Sb₁₂. Acesta a fost preparat printr-o metoda traditionala de tipul topire - tratament termic – sinterizare obtinand probe monofazice care cristalizeaza in structura cubica tipica *I m-3*. Ulterior, pulberi cu aceasta compozitie au fost amestecate cu diferite procente volumice de β-SiC nanometric, intr-o moara planetara cu bile si sinterizate prin spark plasma sintering (SPS).

Proprietatile de transport electric ale materialelor compozite astfel obtinute sunt caracteristice unui semiconductor puternic dopat de tip *n*, cu valori negative ale coeficientului Seebeck, ce descresc cu cresterea temperaturii. Atat conductivitatea electrica, cat si coeficientul Seebeck descresc pe masura ce continutul de β-SiC din probe creste, exceptie facand proba cu adaos minim, respectiv 0.33 v% β-SiC, care prezinta valori mai mari ale conductivitatii electrice decat proba de referinta In_{0.2}Yb_{0.2}Co₄Sb₁₂. Cu toate ca β-SiC are o conductivitate termica mai mare decat a skutteruditului, conductivitatea termica a compozitelor scade usor pe masura ce procentul de SiC din probe creste, exceptie facand proba cu 1%v SiC. Evolutia componentei de retea a conductivitatii termice, κ_L care descreste odata cu cresterea continutului de SiC din probe, poate fi explicata prin intensificarea imprastierilor fononice pe un domeniu mai larg de frecvente la granitele dintre grauntii de In_{0.2}Yb_{0.2}Co₄Sb₁₂ precum si la interfetele SiC/In_{0.2}Yb_{0.2}Co₄Sb₁₂.

Drept consecința a evoluțiilor conductivității electrice și a coeficientului Seebeck cu temperatura, materialele compozite cu un adaos de 0.33 v% β -SiC prezintă o creștere a *factorului de putere*, $PF=S^2\sigma$, pe întreg domeniul de temperatura măsurat. În acest caz, la 400 °C se înregistrează valoarea maximă a PF de $32.7 \times 10^{-4} \text{ W/m}\cdot\text{K}^2$, reprezentând o creștere de circa 8% față de compusul de bază $\text{In}_{0.2}\text{Yb}_{0.2}\text{Co}_4\text{Sb}_{12}$ (figura 1.a). Totodată, pentru aceeași probă este de remarcant creșterea valorilor maxime a ZT la 0.918, cu 8.44% mai mare decât a fazei pure $\text{In}_{0.2}\text{Yb}_{0.2}\text{Co}_4\text{Sb}_{12}$ (figura 1.b).

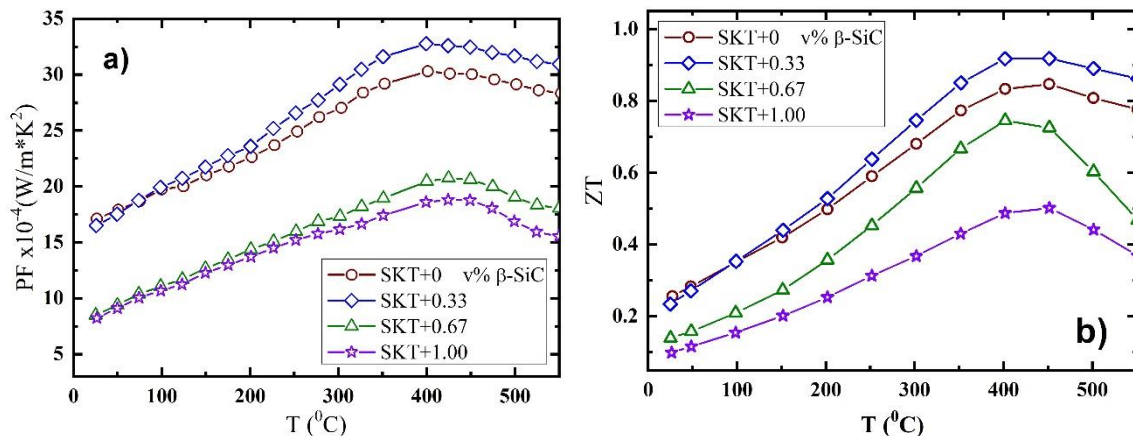


Fig.1: Dependenta de temperatura a factorului de putere a) și a figurii de merit b). în compozite nanostructurate SKT/ β -SiC.

Concluzii și perspective:

$\text{In}_{0.2}\text{Yb}_{0.2}\text{Co}_4\text{Sb}_{12}$ monofazic, cu o stoichiometrie foarte apropiată de cea calculată, a fost obținut printr-o metodă tradițională, urmată de macinare în moară cu bile și de sinterizare asistată de câmpul electric – SPS. Incorporarea în matricea skutteruditului a diferitor procente de β -SiC conduce, pentru concentrații volumice reduse ale acesteia, la îmbunătățirea proprietăților termoelectrice ale materialelor compozite. Astfel, pentru materialul compozit cu numai 0.33 %v β -SiC, s-a obținut o valoare maximă a figurii de merit de 0.918 la 450 °C, cu 8.44% mai mare decât a fazei pure $\text{In}_{0.2}\text{Yb}_{0.2}\text{Co}_4\text{Sb}_{12}$. Concentrații mai mari ale β -SiC conduc la scăderea valorilor conductivității electrice ceea ce, în ansamblu, rezultă în obținerea unor valori mai scăzute ale figurii de merit, ZT.

Investigațiile prezentate aici pot fi completate prin optimizarea procesului de sinteză, care să conducă la îmbunătățirea stoichiometriei skutteruditului și implicit a valorilor figurii de merit. Totodată, aceste rezultate ar putea fi motivul pentru demararea fabricării unui nanocompozit similar având la bază un skutterudit de tip p, și ulterior utilizarea ambelor tipuri de materiale pentru construirea unui element termoelectric.

Titlu Faza: Proprietățile optice ale fotorezistului SU8 și modelarea acestora în prezența nanoparticulelor de carbon

Termen: 4/9/2019

Obiective: evidențierea proprietăților optice ale fotorezistului SU8 și modelarea acestor proprietăți în prezența nanoparticulelor de carbon de tipul nanotuburilor de carbon cu un singur perete funcționalizate cu grupări carboxil (SWNT-COOH).

Rezultate estimate inițial: i) evidențierea proprietăților fotoluminescente ale fotorezistului SU8 în absența și în prezența SWNT-COOH; ii) evidențierea prin studii de fotoluminescență (PL), împrăștiere Raman și spectroscopie de absorbție IR a fotoreticării SU8 în absența și în prezența SWNT-COOH

Rezultate obținute (scurta descriere a celor mai importante rezultate, cu 1-2 imagini/grafice de impact care susțin rezultatele):

Noi rezultate privind influența luminii UV asupra fotopolimerizării cationice a SU8 în absența și în prezența nanotuburilor de carbon au fost raportate prin fotoluminescență (PL), împrăștiere Raman și spectroscopie de

absorbție IR. Rezultatele au evidențiat: i) reacția de fotopolimerizare cationică a fotorezistului SU8 este indusă în prezența luminii UVA, în timp ce în prezența luminii UVB a fost raportată doar o reacție de fotoreticulare parțială a fotorezistului SU8; ii) PL a fost raportată a fi o metodă eficientă în evidențierea reacției de fotopolimerizare cationică a fotorezistului SU8; în acest context, s-a arătat că fotorezistul SU8 prezintă o bandă de PL cu maximumul la ~400 și 429 nm, când lumina de excitație este egală cu 325 sau respective 350 nm; sub lumina UVA, fotopolimerizarea este evidențiată printr-o bandă de PL cu maximumul la 556 nm; procesul de fotopolimerizare cationică a SU8 este confirmat de imprastierea Raman și spectroscopia de absorbție IR; iii) indiferent de tipul de nanotuburilor de carbon cu unu, doi sau mai mulți pereți sau funcționalizate cu grupări carboxil, este raportat un proces de stingere a PL SU8; iv) adăugarea nanotuburilor de carbon în matricea fotorezistului SU8, induce sub lumina UVA, o fotopolimerizare cationică parțială. Fotopolimerizarea cationică parțială este susținută de creșterea absorbției benzii IR situate la 1772 cm^{-1} atribuită modului vibrațional C=O al grupărilor funcționale de tip ester (Fig. 1); v) diminuarea unghiului de legare a fotorezistului SU8 în prezența nanotuburilor de carbon funcționalizate cu grupări carboxil este indusă, conform mecanismului propus în studiile raportate, prin apariția a noi legături covalente între lanțurile macromoleculare ale SU8 și nanotuburile de carbon cu un singur perete funcționalizate cu grupări carboxil de tip ester care au loc simultan cu formarea a noi legături π - π stabilite între inelele fenil ale fotorezistului SU8 și cele ale nanotuburilor de carbon.

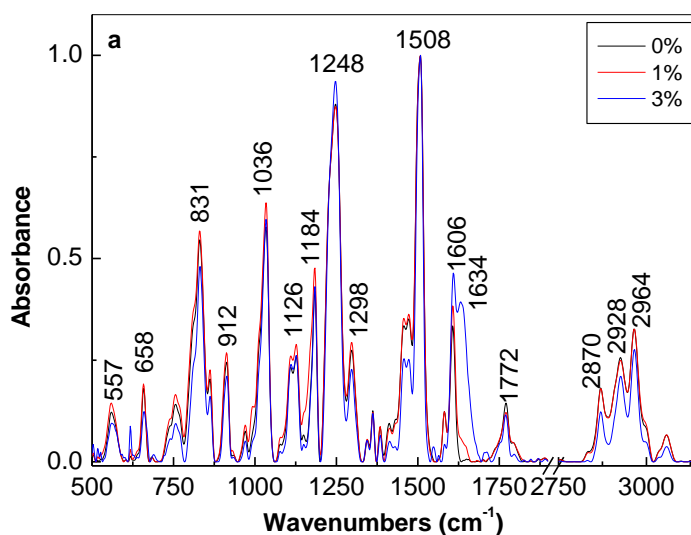


Fig. 1 Spectrele IR ale fotorezistului SU8 (curba neagra) și a compozitului său cu nanotuburilor de carbon, având concentrația de 1% (curba roșie) și 3% (curba albastră) în masa SU8/nanotub de carbon după 3 ore de iradiere UVA.

Concluzii și perspective:

Rezultatele au demonstrat că: i) fotoluminescența poate fi o metodă complementară imprastierii Raman și spectroscopiei de absorbție IR pentru monitorizarea reacțiilor de fotoreticulare ale fotorezistului SU8; ii) reacția de fotopolimerizare a fotorezistului SU8 are loc predominant sub influența luminii UVA, conform studiilor de fotoluminescență, imprastiere Raman și spectroscopie de absorbție IR și iii) o modificare a unghiului de legare a compusului macromolecular pe suprafața nanotuburilor de carbon a fost evidențiată prin studii de fotoluminescență anizotropă, fapt care a permis înțelegerea modului de acoperire a nanotuburilor cu compusul macromolecular. Perspectivele de continuare a acestor studii vizează aplicații în domeniul structurilor imprimate cu jet de cerneală și înțelegerea procesului de fotopolimerizare în cazul altor nanostructuri.

Titlu Faza: Controlul proprietăților magnetice și de structură locală ale unor nanoparticule de tip miez-invelis cu miezul de fier sau oxid de fier prin tratamente termice în atmosfera de hidrogen

Termen: 4/9/2019

Obiective:

1. Prepararea nanoparticulelor de tip miez-înveliș prin piroliză laser.
2. Efectuarea de tratamente termice în atmosferă de hidrogen la diverse temperaturi.
3. Efectuarea de măsurători de structură locală și magnetice.

Rezultate estimate initial:

1. Determinarea compoziției de faze și legătura cu proprietățile magnetice.
2. Determinarea structurii locale și înconjurării specifice (prin spectroscopie Mössbauer).
3. Evidențierea influenței tratamentelor de hidrogenare asupra structurii locale și proprietăților magnetice.

Rezultate obținute (scurta descriere a celor mai importante rezultate, cu 1-2 imagini/grafice de impact care susțin rezultatele):

Nanoparticulele pe bază de fier și de oxizi de fier de tip miez-înveliș sunt nanostructuri excepționale cu efecte importante induse de dimensiune precum coecitivitate ajustabilă față de structuri de dimensiuni mari și comportament superparamagnetic în cazul dimensiunilor reduse considerabil. Ca urmare, sunt de interes ridicat pentru aplicații avansate în biomedicină, cataliză, absorbție de microunde, separare magnetică a biomoleculelor, dispozitive magneto-optice, sisteme de înregistrare magnetică, senzori, stocare de hidrogen, creștere de nanotuburi de carbon și tratamentul apei. Învelișurile protectoare (dintre care carbonul prezintă numeroase avantaje) sunt o abordare viabilă pentru stabilizarea chimică a nanoparticulelor. Sunt prezentate proprietățile structurale, de structură locală și magnetice ale unor nanoparticule de tip miez-înveliș (Fe acoperit de C), precum și ale unor nanoparticule de oxizi de Fe preparate prin piroliză laser netratată (A) tratate termic în atmosferă de hidrogen la 200 (A200C) și 305°C (A305C).

Din rezultatele de difracție de raze X ale probelor de oxizi de fier, se observă că tratamentul termic în atmosferă de hidrogen la o temperatură mai ridicată, de 305 °C, induce cu succes formarea unei faze metalice unice de Fe. Din curbele ZFC-FC ale probelor de oxid de fier (fig.1a) au fost determinate temperaturile de blocare: proba netratată $T_B=106$ K ($M=1.46$ emu/g), proba A200C $T_B=110$ K ($M=1.49$ emu/g). În cazul probei A305C, T_B crește considerabil la 356 K ($M=3$ emu/g) datorită modificării stării de valență a fierului (faza α -Fe metalică). Valorile câmpului coercitiv variază considerabil, de la 900 Oe la temperaturi joase la câteva zeci de Oe la temperatura camerei (fig.1b,c). La temperaturi joase, procedeul de răcire în câmp induce valori puțin mai mari față de procesul de răcire fără câmp. De asemenea, magnetizarea de saturatie crește după tratamentul termic. Constanta de anizotropie magnetocristalină (K_{exp}) poate fi aproximată ca produsul dintre câmpul coercitiv H_C la temperaturi joase și magnetizarea spontană (care poate fi considerată magnetizarea de saturatie la temperaturi joase), deoarece nanoparticulele magnetice au în general comportament de monodomeniu, fără pereți de domenii și pot fi tratate în cadrul modelului Stoner-Wohlfarth. În general, constanta de anizotropie magnetocristalină este de aproximativ 2.2×10^4 J/m³ pentru probele A și A200C.

Au fost investigate compoziția, structura locală și fenomene de relaxare magnetică prin spectroscopie Mössbauer. Spectrele Mössbauer ale probelor C (miez de fier în inveliș de carbon), B și A (oxizi de fier), colectate la temperaturi între 4.5 K și temperatura camerei. Spectrele Mössbauer la temperaturi joase (<50K) ale probelor C (fig.2), B și A prezintă o caracteristică magnetică principală largă atribuită fazelor de oxizi de fier (maghemită sau magnetită sau amestec în configurații distorsionate). În cazul probei C, o fază secundară, mai puțin intensă, este atribuită carburilor de fier. Faza de carbură ar putea fi legată de un efect de amestec între miez și înveliș.

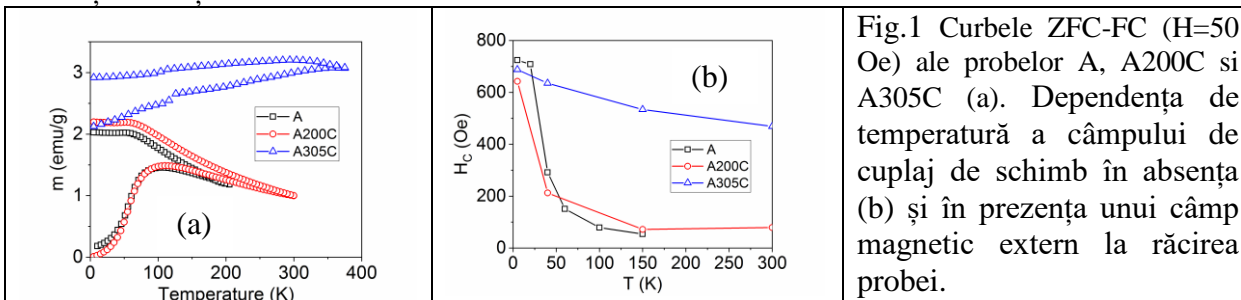


Fig.1 Curbele ZFC-FC ($H=50$ Oe) ale probelor A, A200C și A305C (a). Dependența de temperatură a câmpului de cuplaj de schimb în absența (b) și în prezența unui câmp magnetic extern la răcirea probei.

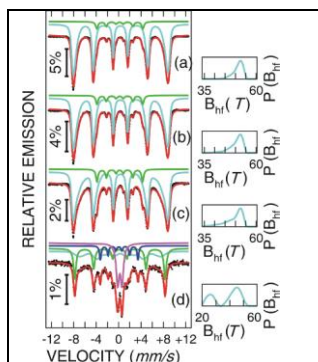


Fig.2 Spectrele Mössbauer ale probei C la 4.5 K (a), 25 K (b), 50 K (c), și temperatura camerei (d).

La temperatura camerei, faza maghemită/martensită este încă predominantă, corespunzând unui sextet cristalin bine format. De asemenea, o distribuție largă de câmpuri magnetice hiperfine cu două maxime la 45 T și la 26 T este atribuită unor faze de magnetită/maghemită în configurații defecte, precum și unei faze Fe-C cauzate de difuzia atomilor de C din înveliș spre miezul de Fe. Oxizii de Fe sunt parțial colapsați într-un dublet paramagnetic datorită relaxării superparamagnetice a nanoparticulelor foarte mici. La temperatura camerei, faza de carbură de fier este identificată precis ca fiind cementita, Fe₃C. Deși particulele au diametre de câțiva nanometri, la temperaturile cele mai mici se găsesc în stare blocată, cu temperaturi de blocare mai ridicate. După tratamentul termic în atmosferă de hidrogen la 200°C asupra probei A, spectrele colectate la temperaturi până la 180°C prezintă o caracteristică magnetică relativ îngustă și au fost fitate cu trei componente magnetice principale atribuite oxizilor de fier maghemită și magnetită. O fracție redusă din spectre este legată de prezența fazei metalice α-Fe. Însă la temperatura camerei sunt prezente fenomene de relaxare, în strânsă legătură cu dimensiunea nanometrică a particulelor. Tratamentul termic la 305°C determină cu succes cristalizarea nanoparticulelor într-o fază unică α-Fe, în concordanță cu rezultatele difracției.

Concluzii și perspective: În această raportare sunt prezentate studii complexe asupra unor nanoparticule de Fe înglobate în matrice de C și nanoparticule de oxizi de Fe. Acestea au fost preparate prin piroliză laser. Din măsurători de spectroscopie Mössbauer asupra compozitului Fe-C s-a evidențiat prezența carburilor (datorită penetrării învelișului de C în miezul de Fe) și a oxizilor (datorită oxidării nanoparticulelor de Fe rămase neacoperite de C). Nanoparticulele de oxizi de Fe au fost tratate termic în atmosferă de hidrogen la 305°C pentru a evidenția efectul asupra proprietăților de structură locală și magnetism. Probele netratate au constat din oxizi de fier. Însă tratamentul termic în atmosferă de hidrogen a reușit să inducă formarea unei faze de α-Fe pură, fără prezența oxizilor. Această raportare arată că se poate obține cu succes înlăturarea oxizilor din nanoparticule de Fe prin tratamente ulterioare în atmosferă de hidrogen. Nanoparticulele rezultante sunt stabile cu oxidarea.

Titlu Faza: Studii coloidale ale hidroxiapatitei dopate cu argint și studii de citotoxicitate pe celule procariote.

Termen: 5/09/2019

Obiective: Acest studiu s-a axat pe obținerea unor geluri de hidroxiapatita dopata cu argint (AgHAp). Stabilitatea gelurilor AgHAp sintetizate prin metoda sol-gel a fost evaluată prin intermediul studiilor coloidale. Din punct de vedere coloidal, gelurile au fost investigate prin măsurători cu ultrasunete, ceea ce reprezintă o nouă noutate în acest domeniu. Testele de biocompatibilitate au arătat că gelurile AgHAp nu prezintă nici o toxicitate față de celulele HeLa. Mai mult, studiul privind citotoxicitatea gelurilor AgHAp împotriva microorganismelor a subliniat faptul că acestea au prezentat un efect inhibitor asupra celulelor bacteriene *S. aureus* și, de asemenea, asupra celulelor fungice *C. albicans*.

Rezultate estimate inițial:

Rezultatele preconizate a fi atinse pentru realizarea obiectivului acestei faze sunt:

- obținerea unor solutii sub forma de geluri ceramice antimicrobiene AgHAp (hidroxiapatita dopata cu argint)
- evaluarea atenuării prin masuratori de ultrasunete

- determinarea stabilitatii solutiilor
- corelarea stabilitatii particulelor cu atenuarea obtinuta din masuratorle cu ultrasunete
- studii de citotoxicitate pe celule procariote

Prin studiile prezentate in acest raport s-au pus bazele obtinerii unui material nou ce ar putea fi utilizat in diferite aplicatii din domeniul medical.

Rezultate obtinute (scurta descriere a celor mai importante rezultate, cu 1-2 imagini/grafice de impact care sustin rezultatele):

Măsurătorile cu ultrasunete ne-au permis să obținem informații privind stabilitatea gelurilor rezultate AgHAp-S1 și AgHAp-S2. Scopul a fost de a înregistra cinci ecouri pentru fiecare eșantion, indiferent de gradul de atenuare. Examinarea s-a concentrat asupra celui de-al doilea ecou, deoarece primul ecou este prea puternic. Același al doilea ecou a fost selectat pentru fiecare dintre cele două probe AgHAp-S1 și AgHAp-S2 rezultate. Același cel de-al doilea ecou înregistrat pentru fiecare din cele două probe este prezentat în Figura 1. Axa ce reprezintă momentele de înregistrare este diferită pentru cele două eșantioane, de la 300 s (AgHAp-S1) la 1600 (AgHAp-S2). Fiecare eșantion indică o perioadă de precipitații în vrac, în timpul căreia amplitudinile semnalului se schimbă lent și liniar. Apare apoi o perioadă de tranziție relativ rapidă, în timpul căreia suprafața de separare dintre suspensia precipitantă și solvent, trece în fața traductoarelor. Ultima perioadă reprezintă evoluția lentă asimptotică față de solventul pur. Variația amplitudinii semnalului în prima perioadă nu este identică pentru cele două eșantioane (Figura 4). Proba AgHAp-S1 prezintă o creștere liniară a amplitudinii în decurs de 100 de secunde (Figura 4a). Proba AgHAp-S2 a prezentat o scădere liniară a amplitudinilor în prima perioadă. Proba AgHAp-S2 are o scădere rapidă a amplitudinii în timpul perioadei de tranziție, urmată de o creștere lentă (mai mult de 400 s) a amplitudinii către starea stabilă.

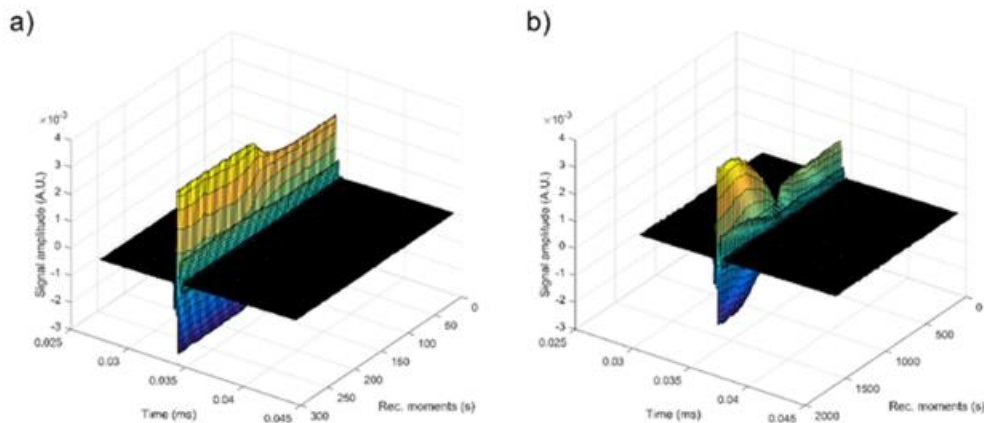


Figura 1: Acelasi al 2-lea ecou selectat pentru investigatie pentru probele AgHAp-S1(a) si AgHAp-S2 (b).

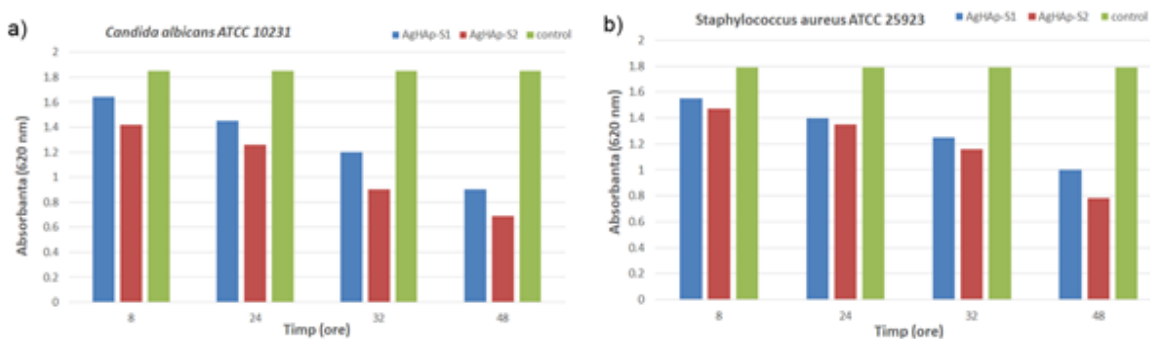


Figura 2: Teste de viabilitate celulara. a) dezvoltarea celulelor *Candida albicans* ATCC 10231 timp de 8, 24, 32 si 48 de ore in prezenta solutiilor AgHAp; b) dezvoltarea celulelor *Staphylococcus aureus* ATCC 25923 timp de 8, 24, 32 si 48 de ore in prezenta solutiilor AgHAp.

Acest

fenomen este explicat printr-o posibilă concentrație a particulelor în fața suprafeței de separare, cuplată cu o variație semnificativă a vitezei undei acustice, de la valoarea vitezei în suspensie la valoarea în solvent. Rezultatele obținute în acest studiu prin tehnica cu ultrasunete privind stabilitatea gelului au arătat că amplitudinile au o variație liniară a amplitudinii semnalului în timp, în timpul primei etape și viteza undelor ultrasonice nu este monotonă cu creșterea concentrației de suspensie. Mai mult, durata primei perioade este un bun indicator al stabilității suspensiei. Pentru gelurile analizate, atât parametrul de stabilitate cât și durata primei perioade au furnizat informații relevante privind stabilitatea soluțiilor. În comparație cu metodele propuse în studiile anterioare [1-5] care măsoară atenuarea ultrasonică cvasi-statică, am propus utilizarea unui parametru de stabilitate care să surprindă comportamentul dinamic al suspensiei. Nu există o procedură standard, nici un dispozitiv dedicat, ci o cercetare în curs de desfășurare, cu rezultate promițătoare. Stabilirea stabilității gelurilor obținute prin tehnica cu ultrasunete este foarte importantă deoarece diluțiile necesare pentru utilizarea metodei tradiționale de potențial ζ pot duce la distrugerea agregatelor și la modificarea mediului de suspensie [6].

Activitatea antimicrobiana a solutiilor AgHAp-S1 si AgHAp-S2 a fost evaluata prin studierea viabilitatii celulare a doua tulpini microbiene semnificative in prezenta probelor de hidroxiapatita dopata cu argint. Tulpinile microbiene alese pentru experimente sunt unele dintre cele mai frecvente microorganisme responsabile pentru infectiile prezente in viata de zi cu zi. Efectul solutiilor de AgHAp-S1 si AgHAp-S2 asupra dezvoltarii celulare a tulpinilor microbiene de *C. albicans* si *S. aureus* sunt prezentate in Figura 2.

Concluzii si perspective:

Solutii stabile de hidroxiapatita dopata cu argint au fost obtintute prin metoda sol-gel. Stabilitatea solutiilor de AgHAp a fost studiata prin masuratori de ultrasunete fara a fi necesara o dilutie prealabila. Mai mult decat atat, proprietatile antimicrobiene ale AgHAp-S1 si AgHAp-S2 au fost evaluate *in vitro* utilizand doua dintre cele mai comune tulpini microbiene, *C. albicans* si *S. aureus*. Rezultatele obtinute din studiile bazate pe masuratori cu ultrasunete au evidentiat stabilitatea suspensiilor concentrate de AgHAp. Evaluarea *in vitro* a activitatii antimicrobiene a solutiilor AgHAp au indicat ca ambele probe au inhibat dezvoltarea celulelor fungice de *C. albicans* si a celulelor bacteriene *S. aureus*. Testele de citotoxicitate împotriva celulelor microbiene au arătat AgHAp-S2 a prezentat o toxicitate mai puternică față de dezvoltarea celulelor atât pentru celulele bacteriene *S. aureus*, cât și pentru celulele fungice *C. albicans*. Rezultatele acestui studiu au aratat ca solutiile de hidroxiapatita dopate cu argint prezintă proprietăți antimicrobiene puternice si ar putea fi utilizate în dezvoltarea de agenti antimicrobieni cu proprietăți biocompatibile. Prin realizarea acestor obiective majore In viitor se vor incerca utilizarea acestor suspensii stabile cu proprietati antimicrobiene in realizarea de straturi acoperitoare care putea fi utilizate in industria medicala pentru acoperirea unor proteze utile in ortopedie si stomatologie si care ar putea contribui la scaderea riscului de infectii postoperatorii.

Bibliografie

1. Povey, M.J.W. Ultrasound particle sizing: A review, *Particuology*, **2013**, *11*, 135–147.
2. Stoch, A.; Jastrzebski, W.; Długon, E.; Lejda, W.; Trybalska, B.; Stoch, G.J.; Adamczyk, A. Sol-gel derived hydroxyapatite coatings on titanium and its alloy Ti6Al4V. *J. Molec. Struct.* **2005**, *744*, 633–640.

- Zreiqata, H.; Valenzuelab, S.M.; Nissanc, B.B.; Roestc, R.; Knabed, C.; Radlanskid,R.J.; Renzd,H.; Evanse,P.J. The effect of surface chemistry modification of titanium alloy on signalling pathways in human osteoblasts. *Biomaterials* **2005**, *26*, 7579–7586.
- Himratul-Aznita, W.H.; Mohd-Al-Faisal, N.; Fathilah, A.R. Determination of the percentage inhibition of diameter growth (PIDG) of Piper betle crude aqueous extract against oral Candida species. *J. Med. Plants Res.* **2011**, *5*, 878-884.
- Cavalcanti, Y.W.; Wilson, M.; Lewis, M.; Del-Bel-Cury, A.A.; da Silva, W.J.; Williams, D.W. Modulation of Candida albicans virulence by bacterial biofilms on titanium surfaces. *Biofouling*, **2016**, *32*, 123–134 doi.org/10.1080/08927014.2015.1125472.
- Franci, G.; Falanga, A.; Galdiero, S.; Palomba, L.; Rai, M.; Morelli, G.; Galdiero, M. Silver nanoparticles as potential antibacterial agents. *Molecules* **2015**, *20*, 8856–8874.

Titlu Faza: Materiale feroelectrice fara plumb crescute epitaxial

Termen: 6/10/2019

Obiective: Obținerea de tinte de materiale feroelectrice fara plumb si apoi utilizarea lor pentru cresterea de straturi subtiri epitaxiale, precum si de multistraturi. Caracterizarea structurala si electrica preliminara.

Rezultate estimate initial: Utilizarea tehnologiei ceramice standard pentru producerea unor pastile ceramice din materiale feroelectrice fara plumb cum ar fi BaSrTiO₃ (BST), cu diferite concentratii de Sr. Caracterizarea structurala a pastilelor, evidentiind proprietatile feroelectrice, eventual piroelectrice. Utilizarea pastilelor ceramice pentru depunerea de straturi subtiri epitaxiale utilizand tehnica PLD. Caracterizarea structurala si investigarea preliminara a proprietatilor piroelectrice.

Rezultate obtinute (scurta descriere a celor mai importante rezultate, cu 1-2 imagini/grafice de impact care sustin rezultatele):

Au fost obtinute tinte solide de BST in faza unica, conform difractogramelor de raze X, figura 1, procesul de realizare a acestora fiind metoda sintezei in faza solida. Caracterul feroelectric al tintelor a fost testat prin masuratori de polarizare-tensiune.

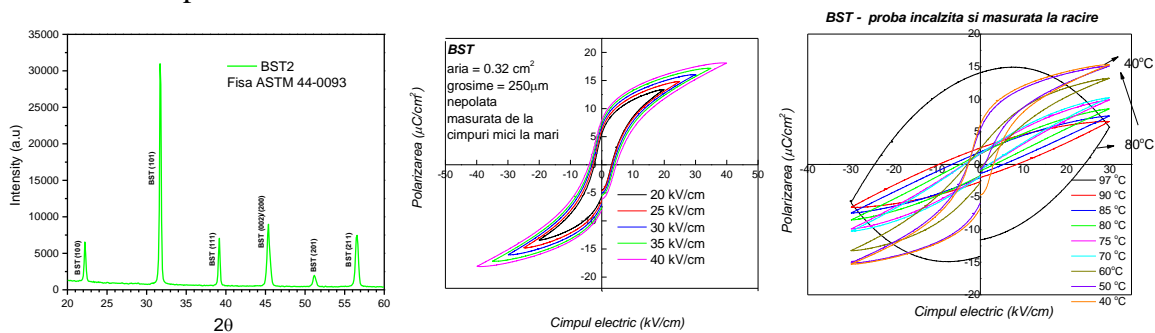


Fig.1. Difractograma de raze X si curbele de polarizare-tensiune caracteristice pastilelor de BST. Pastilele de BST au fost folosite ca si tinte pentru realizarea depunerilor prin metoda PLD, astfel au fost realizate filme subtiri de calitate epitaxiala dupa cum a reiesit din difractogramele XRD, figura 2.

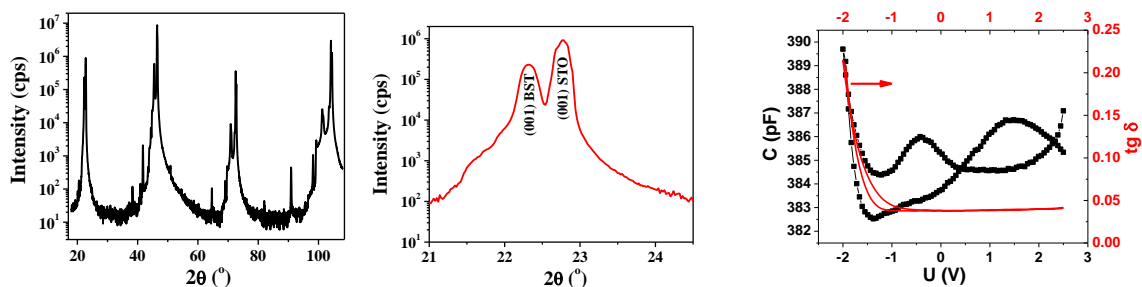


Fig.2. Difractograme XRD si caracteristica capacitate tensiune realizate pe filmele subtiri de tip multistrat din tintele de BST. Rezultate sunt prezentate in figura 3 de mai jos.

Masuratorile de capacitate-tensiune (C-V) prezentate in graficele de mai sus releva prezenta formei „fluture” (butterfly) in caracteristica C-V, ceea ce sugereaza prezenta feroelectricitatii. Totusi, pierderile cresc destul de rapid cu tensiunea aplicata, ceea ce duce la strapungerea structurilor multistrat. Pentru a se confirma prezenta ordinii polare in structurile epitaxiale multistrat au fost efectuate si niste masuratori de semnal piroelectric la diferite frecvente, utilizand un modulator mecanic si surse de lumina de tip dioda laser sau lampa cu incandescenta (LI), prezentate in figura 3.

Se observa ca:

- semnalul pentru P41 ramane aproape acelasi pana la frecventa de 400 Hz, in timp ce la P40 scade la frecvente mari;
- la frecvente mai mici de 10 Hz semnalul nu prea este stabil si zgomotul este mare; dupa aceasta frecventa, lucrurile se schimba, semnalul e clar la fiecare valoare a frecventei si la obturare am o valoare de 10-12 uV .

Masuratorile au fost realizate cu mentinerea distantei sursa-proba la 3.5 cm.

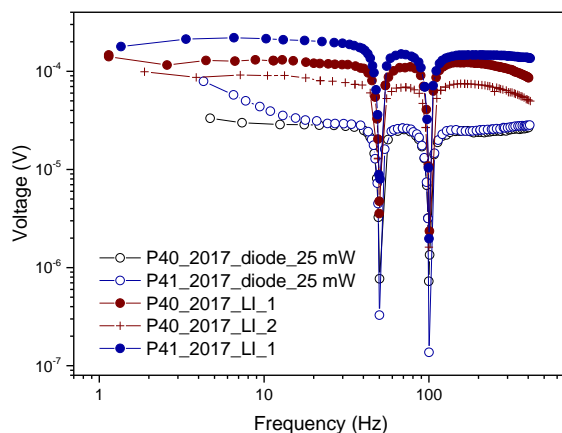


Fig.3. Masuratori piroelectrice realizate pe filme subtiri de tip multistrat din tinte de BST.

Concluzii si perspective:

Rezultatele prezentate mai sus arata ca se pot obtine straturi si multistraturi epitaxiale din materiale feroelectrice fara plumb, prezenta feroelectricitatii fiind confirmata de masuratori C-V si de semnal piroelectric. In perspectiva avem in vedere optimizarea proprietatilor feroelectrice si piroelectrice a filmelor subtiri prin modificarea parametrilor de depunere si a tratamentelor post depunere. Acestea vor conduce la minimizarii curentilor de scurgere si implicit la imbunatatirea raspunsului piroelectric.

Titlu Faza: Materiale nanocompozite pe baza de derivați de celuloza si particule de carbon pentru obținerea de platforme senzoriale 3D flexibile

Termen: 7/9/2019

Obiective: Obținerea de materiale nanocompozite pe bază de derivați de celuloză și particule de carbon pentru obținerea de platforme senzoriale 3D flexibile.

Rezultate estimate inițial:

- perfecționarea procedurii de fabricare a unor materiale compozite pe bază de lianți biopolimerici de celuloză și materiale de carbon;
- electrofilarea materialelor compozite pentru obținerea de matrice 3D;
- caracterizarea morfologică și electrochimică a matricelor 3D pe bază de materiale compozite;
- testarea matricelor 3D ca platforme senzoriale pentru analiți de interes.
- o lucrare științifică trimisă spre publicare la un jurnal indexat Web of Science®

Rezultate obținute: Pentru fabricarea materialelor compozite flexibile s-au folosit acetatul de celuloza (CA) si negru de fum (NF). CA a fost dizolvat într-un amestec de acetona si ciclohexanona 50:50 (v:v) in care ulterior NF a fost dispersat pentru a obține o pasta omogena, întinsa uniform pe o suprafața de sticla folosind *byko-drive*

Auto Applicator. După uscare s-a obținut un film de aproximativ $6.5 \mu\text{m}$, estimat din măsurători de microscopie electronica de baleaj (SEM). Din punct de vedere morfologic, suprafața electrodului este rugoasa și granulara (vezi **Fig. 1A, B**), cu o distribuție uniformă a granulelor de negru de fum cu diametre între 30 și 80 nm.

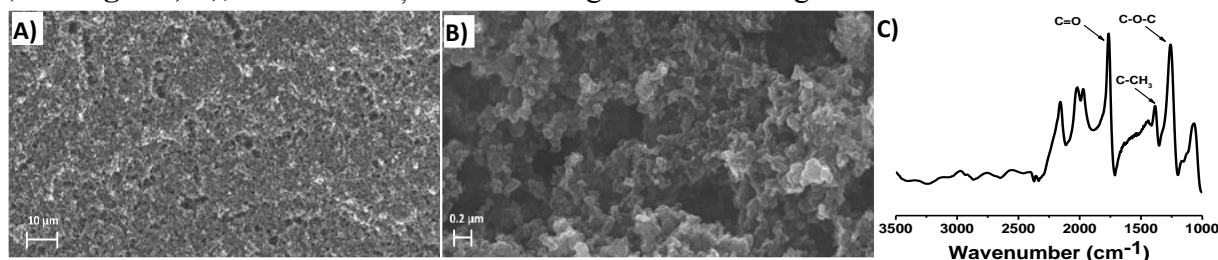


Fig. 1. A) și B) Imagini SEM obținute la doua mărimi și C) spectrul FTIR ale materialului compozit pe baza CA și NF.

Din spectrul FTIR obținut cu modulul ATR pentru compozitul pe baza de CA și NF (**Fig. 1C**) se poate identifica amprenta acetatului de celuloza evidențiindu-se grupările C=O la 1760 cm^{-1} , C-CH₃ la 1375 cm^{-1} și C-O-C la 1260 cm^{-1} .

Prin măsurători de voltametrie ciclica, **Fig. 2 A și B**, s-a determinat fereastra de potențial, estimată ca fiind între -0.5 și $0.7 \text{ V vs. Ag/AgCl}$, și capacitanța electrodului de $\approx 0.5 \text{ mF cm}^{-2}$. Electrozii din material compozit de CA și NF au fost caracterizați și prin spectroscopie de impedanță electrochimică, spectrele înregistrate fiind ajustate cu un circuit echivalent format dintr-un rezistor $R1$ asociat rezistenței celulei electrochimice, în serie cu o combinație paralela a unui rezistor $R1$ și un $CPE1$ datorată fenomenelor de separare de sarcină electrică la interfața electrod/soluție, în serie cu un alt element de fază constantă $CPE2$ atribuit unei capacitance intrinsece a materialului. Valorile capacitancei electrodului ($CPE2$) calculate au fost asemănătoare cu cele determinate prin măsurătorile de CV, fiind estimate ca fiind de aprox. 0.6 mF cm^{-2} .

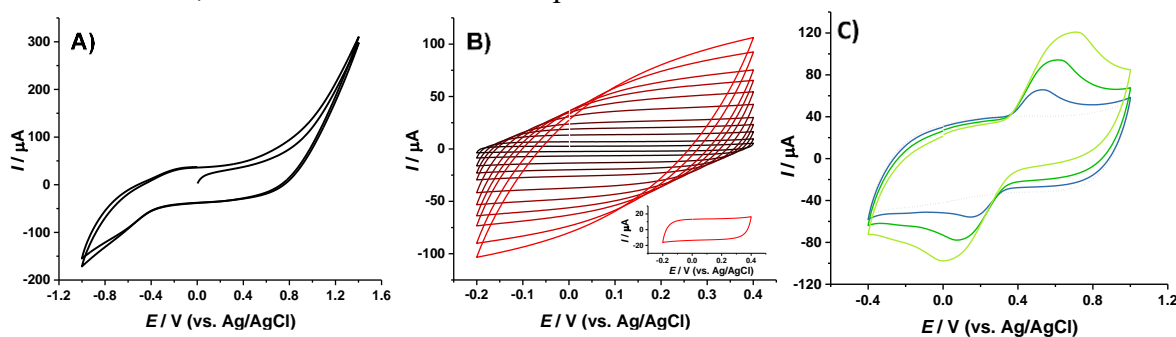


Fig. 2.

Voltamograme ciclice înregistrate la electrozii din material compozit de CA și NF într-o soluție de $0.1 \text{ M NaCl} + \text{KCl}$ la A) $v = 100 \text{ mV s}^{-1}$; B) diferite valori ale vitezei de baleiaj între 10 și 500 mV s^{-1} și C) la concentrații de 100 , 200 și $400 \mu\text{M}$ dopamină.

Electrozii din compozit de CA și NF au fost folosiți ca senzori electrochimici pentru determinarea dopaminei prin voltametrie ciclica, **Fig. 2C**, observându-se un proces reversibil de transfer de sarcină corespunzător reacțiilor de oxido-reducere ale acesteia și o creștere liniară a curenților de pic cu mărirea concentrației de dopamina, ceea ce demonstrează posibilitatea folosirii acestui material în dezvoltarea de senzori electrochimici.

Concluzii și perspective:

- ✓ S-au obținut electrozi din materiale compozite pe baza de celuloza și nanostructuri de carbon, utilizând acetatul de celuloza și negrul de fum.
- ✓ Imaginile de microscopie electronica de baleiaj au evidențiat o suprafața rugoasă și granulară cu particule având diametre între 30 și 80 nm.
- ✓ Măsurătorile electrochimice de voltametrie ciclica și spectroscopie de impedanță electrochimică au evidențiat caracterul capacitiv al materialului, favorabil pentru dezvoltarea de senzori electrochimici, acesta fiind utilizat cu succes pentru detecția electrochimică a dopaminei.

- ✓ Se are în vedere utilizarea acestor materiale în dezvoltarea de biosenzori.
- ✓ Toate obiectivele fazei au fost îndeplinite.
- ✓ Se are în vedere utilizarea acestor materiale compozite pentru dezvoltarea de biosenzori.

Titlu Faza: (a) Depunere și caracterizare a filmelor subțiri pe bază de oxid de hafniu dopat sau nedopat pentru aplicații/ (b) Investigare proprietăți fizice, inclusiv feroelectrice, a filmelor subțiri pe bază de oxid de hafniu dopat sau nedopat pentru aplicații electronice.

Termen: 14/06/2019 și 12/09/2019

Obiective: Această fază a avut ca obiectiv principal optimizarea parametrilor de depunere în vederea obținerii de filme subțiri pe bază de oxid de hafniu de calitate ridicată, utilizând metode de depunere fizică din plasmă – PVD (pulverizare asistată de magnetron și ablație cu fascicul laser pulsant). Direcția către care sunt îndreptate aceste materiale se dorește a fi industria aplicațiilor electronice, cu accent pe memoriile nevolatile.

Rezultate estimate inițial: A fost vizată obținerea de straturi subțiri de $Zr_xHf_{1-x}O_2$ (HZO) și $Al_xHf_{1-x}O_2$ (AHO) prin pulverizare asistată de magnetron și depunere laser pulsantă, caracterizarea filmelor subțiri de HZO și AHO prin măsurători structurale (XRD, SEM), morfologice (AFM) și optice (elipsometrie spectroscopică), integrarea straturilor subțiri de Zr:HfO₂ și Al:HfO₂ în structuri de tip capacitor și investigarea proprietăților dielectrice/feroelectrice ale acestora, integrarea straturilor subțiri de HZO și AHO în heterostructuri complexe de tip MFS sau MOS și caracterizarea electrică a acestora.

Rezultate obținute:

Structurile pe bază de HfO₂ prezintă un potențial ridicat pentru integrarea în dispozitive de tip tranzistori cu efect de câmp cu proprietăți feroelectrice, deopotrivă datorită compatibilității cu tehnologia CMOS, dar și a caracterului feroelectric al oxidului de hafniu dopat ce poate fi indus în condiții speciale. Originea feroelectricității HfO₂ se pare că rezidă în structurarea în fază cristalină ortorombică, non-centrosimetrică (grup spațial Pca2₁), structură metastabilă.

Filmele subțiri de HZO depuse prin pulverizare asistată prin magnetron au fost crescute la temperatura ambiantă, pe substraturi de siliciu și integrate între electrozi de TiN. Straturile de HZO prezintă suprafețe uniforme, netede, structura cristalină dorită a fost obținută în urma tratamentului termic aplicat post-depunere. Materialele obținute prin această metodă prezintă pierderi dielectrice prin conducție, motiv pentru care caracterul feroelectric s-a putut pune în evidență doar prin măsurători capacitate-tensiune (prin forma tip „fluture” a caracteristicii). Detecția histerezisului feroelectric nu s-a putut realiza din cauza curenților de scurge importanți.

O posibilitate de îmbunătățire a performanțelor dielectrice/feroelectrice ale straturilor subțiri pe baza de oxid de hafniu constă în scăderea concentrației de defecte, și acest lucru s-a realizat prin creșterea epitaxială a structurilor pe substraturi monocristaline de SrTiO₃ (STO), prin depunere laser pulsantă. Stresul intern impus de substrat poate favoriza, în anumite condiții, formarea fazei ortorombice Pca2₁ necesară pentru apariția efectului feroelectric în acest tip de material. La_{0.7}Sr_{0.3}MnO₃ (LSMO) a fost utilizat ca electrod inferior și strat buffer, filme subțiri de HZO fiind crescute pe structurile LSMO//STO (001). Ca electrod superior au fost folosite o serie de materiale: SrRuO₃, LSMO, TiN și Au. Au fost fabricate și structuri LSMO/HZO/LSMO//STO (001) compacte și continue, electrodul superior de LSMO fiind ulterior patternat prin corodare chimică. Analog cu aceste structuri fabricate prin ablație, au fost obținute unele care integrează straturi subțiri de Al_{0.06}Hf_{0.96}O₂ (AHO) pentru a observa influența dopantului. În același timp, pentru a evalua posibilitatea integrării în dispozitive de tip FeFET, au fost fabricate configurații de tip MOS sau MFS în care filme de HZO, respectiv de AHO au rol de dielectric/feroelectric.

Toate probele fabricate prin ablație laser pulsantă prezintă suprafețe uniforme și netede, rugozitatea cea mai ridicată fiind observată pe structurile de tip MFS care includ semiconductorul amorf (InGaZnO₄). Calitatea structurală a fost pusă în evidență prin XRD de înaltă rezoluție, precum și prin microscopie electronică prin transmisie. Analizele imaginilor TEM evidențiază modul de creștere a filmelor subțiri relativ la substrat (fig. (a)), spoturile de difracție de electroni ale planurilor care au difractat oferă informații despre structurile cristaline

corespunzătoare: cubică pentru STO, ortorombică pentru LSMO, ortorombică pentru HZO. Imaginile HRTEM de la cele trei interfețe confirmă creșterea epitaxială a LSMO-ului pe STO și a HZO-ului pe LSMO, la respectivele interfețe observându-se un anumit stres (constrângere de creștere epitaxială). Toate probele ce includ straturi de HZO prezintă maxime de difracție de raze X asociate fazei ortorombice dorite – fig. (b). De asemenea, se observă oscilații în jurul liniilor de difracție a STO care apar pe toate probele cu LSMO inferior subțire, sunt franje cauzate de acest strat, indicând interfețe netede la nivel atomic și o structură foarte ordonată, fenomen prezent în cazul structurilor epitaxiale.

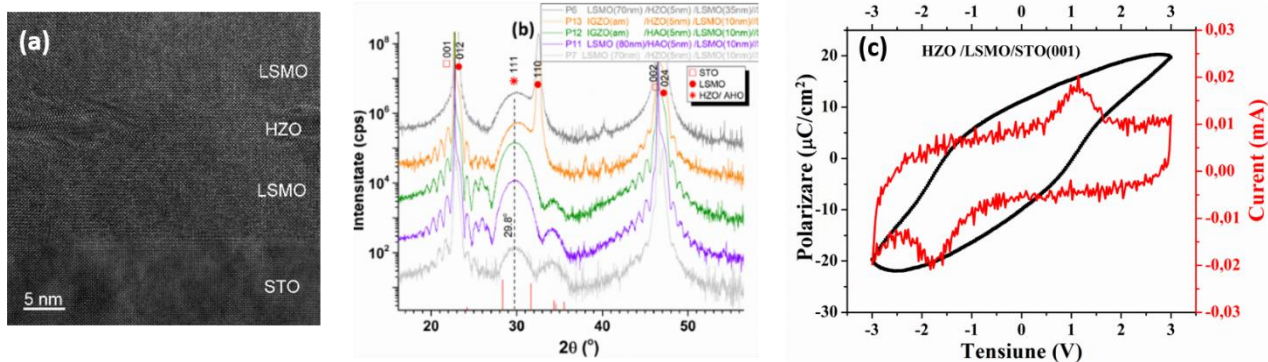


Fig. (a) Imagine

TEM înregistrată pe o structură LSMO/HZO/LSMO/STO; fig. (b) difactograme de raze X ale structurilor capacitor epitaxial cu straturi HZO, respectiv AHO și ale configurațiilor tip MOS/MFS; fig. (c) ciclul de histerezis în polarizare și curent înregistrat pe o structură Au/HZO/LSMO/STO.

Capacitorii epitaxiali cu HZO și AHO prezintă pierderi dielectrice ridicate, dar spre deosebire de configurațiile fabricate prin pulverizare, permit înregistrarea ciclurilor de histerezis (fig. (c)), atât în polarizare, cât și în curent, obținându-se o polarizare remanentă $>10\mu\text{C}/\text{cm}^2$. Aceste caracteristici pledează pentru caracterul ferroelectric al straturilor de HZO crescute epitaxial și recomandă materialul pentru aplicații în domeniul memoriilor nevolatile. Valorile pierderilor dielectrice și ale curenților de scurgere scad drastic atunci când deasupra straturilor de HfO_2 dopat se depune un strat de IGZO, iar forma curbilor I-V sugerează prezența fenomenului de comutare rezistivă unipolară.

Concluzii și perspective: Activitățile propuse în faza de Nucleu au fost derulate, iar obiectivul principal al fazei a fost atins. Au fost fabricate configurații variate pe bază de HfO_2 , iar caracterul ferroelectric al filmelor subțiri de oxid de hafniu dopat a fost pus în evidență, în cele din urmă prin măsurători de histerezis ferroelectric și capacitate. În majoritatea cazurilor studiate, structura cristalină necesară inducerii ferroelectricității a fost obținută (în special în filmele epitaxiale), ceea ce a favorizat înregistrarea parametrilor electrici doriți. Pe configurațiile MFS a fost observat fenomenul de comutare rezistivă unipolară care depinde puternic de dopajul din HfO_2 .

Proiectul ar putea continua prin modificarea rețetelor de fabricare în direcția obținerii caracteristicilor dorite sau amplificarea parametrilor de interes. De asemenea, cercetarea pe acest subiect se poate continua cu un studiu mai amplu al fenomenului de comutare rezistivă unipolară a structurilor MOS/MFS cu HfO_2 dopat ca material dielectric și IGZO ca semiconductor.

Titlu Faza: Noi compusi Heusler. Studiul proprietatilor magnetice si termoelectrice in raport cu structura electronica specifica

Termen: 07/12/2019

Obiective: Prezenta faza a proiectului presupune caracterizarea structurii electronice și a proprietatilor de transport, în noul compus cuaternar Heusler CoFeZrSi , prin modelare teoretică folosind Teoria Funcțională de Densitate (Density Functional Theory – DFT) pentru posibile aplicații spintronice și termoelectrice.

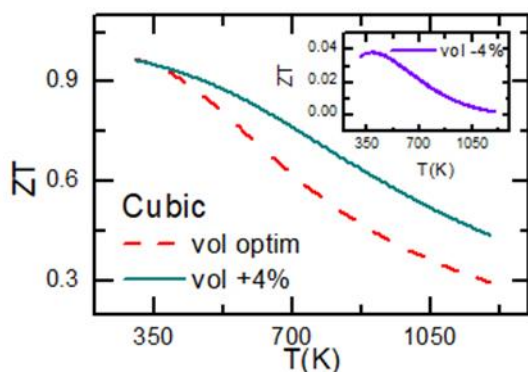
Rezultate estimate inițial: Dispozitivele electronice având compusi Heusler cuaternari $\text{XX}'\text{YZ}$, cu o distribuție ordonată a atomilor, în general au o disipare a puterii mai mică comparativ cu cele având în componență materiale pseudo-ternare tipice $\text{X}_2\text{Y}_{1-x}\text{Y}'_x\text{Z}$. Acest fenomen se datorează faptului că o distribuție aleatoare a atomilor, implică o împrăștiere adițională a electronilor și conduce la o creștere a rezistivității totale. Structura compusilor cuaternari $\text{XX}'\text{YZ}$ cu stoichiometrie 1:1:1:1, derivă dintr-una din cele două structuri Heusler tipice,

avand unul din prototipurile LiMgPdSn sau LiMgPdSb, cu diferite ocupari ale pozitiilor atomice din cadrul rețelei, descrisa de intrepatrunderea a doua subrețele cubice si anume: Tipul I –Si(4a)Fe(4c)Zr(4b)Co(4d), Tipul II- Si(4a)Zr(4c)Fe(4b)Co(4d) sau Tipul III-Fe(4a)Si(4c)Zr(4b)Co(4d).

Raportat recent in literatura ca un potential material feromagnetic moale, CoFeZrSi a motivat prezentul studiu. Astfel, pe baza Teoria Functionalei de Densitate, au fost investigate teoretic “ab initio” proprietatile magnetice de semi-metal si de transport, asociate deformatiilor structurii cristaline tipice.

Rezultate obtinute (scurta descriere a celor mai importante rezultate, cu 1-2 imagini/grafice de impact care sustin rezultatele):

Materialele nano-structurate, compuse din straturi magnetice subtiri cu proprietati semi-metalice (half-metallic properties) crescute pe straturi tampon sau cu proprietati antiferomagnetice au atras in ultimii ani un interes stiintific semnificativ. Cu toate acestea, rezultatele raportate si disponibile in literatura releva faptul ca distorsiunile sau dezorganizarea in rețeaua cristalina in cazul filmelor subtiri constituie unul dintre cele mai mari impedimente in producerea materialelor termoelectrice multitrat. In acest context, au fost studiate deformatiile in urma carora celula unitate trece din structura cubica, fie in cea tetragonala (prin modificarea raportului c/a cu -4% respectiv 2% precum si cresterea/descrerea volumului (+4% / -4%) sau in cea triclinica (pentru care in plus de modificarile utilizate in studiul structurii tetragonale, a fost micșorat si unghiul γ cu un grad).



Figură 1 Eficiența materialului CoFeZrSi studiat în funcție de temperatură pentru structura optimă energetic și cubică a cărui volum crește cu +4%.

Structurile de benzi electronice obtinute pentru structurile descrise mai sus au constituit punctul de plecare pentru analiza proprietatilor de transport (coeficientii Seebeck si conductibilitatea electrica in functie de timpul de relaxare) folosind codul BoltzTraP [4] implementat pe baza ecuatiilor semi-clasice, de transport ale lui Boltzmann.

Eficiența unui material termoelectric poate fi evaluata prin parametrul termoelectric de calitate adimensional $ZT = S^2\sigma T/\kappa_{te}$ unde S , σ , T si κ_{te} sunt coeficientul Seebeck, conductibilitatea electrica, temperatura absoluta si respectiv conductibilitatea termica electronica. Asa cum se poate observa din Figura 1 eficiența materialului studiat este ridicata la 350K. In plus, cu cat structura devine din ce in ce mai relaxata, fara insa sa isi modifice structura cristalina favorabila energetic (cubica), eficiența termoelectrica a materialului caracterizata de constanta adimensionala ZT se imbunatateste.

Bibliografie:

- [1] T.Kanbe, A.Hashimoto, and T.Fukushima, US Patents US20110235479 A1(2011), US8270286 B2(2012), US20130194901 (2013).
- [2] P. Blaha, K. Schwarz, G. Madsen, D. Kvasnicka si J. Luitz (2009) Wien2k An Augmented PlaneWave Plus Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties, WIEN2k code, ISBN 3-9501031-1-2 .
- [3] A. Birsan J. Alloys Compd 710 (2017) 339
- [4] G.K.H. Madsen D.J.Singh,BoltzTraP. (2006) Computer Physics Communications, 175 (1), pp. 67-71.

Concluzii si perspective: S-a demonstrat ca aliajul CoFeZrSi prezinta un parametru termoelectric de calitate adimensional ZT semnificativ de mare in cazul cristalizarii in structura cubica si tetragonala, inasa daca unghiul γ descreste cu un grad si structura cristalina devenind triclinica, compusul isi pierde din proprietatile termoelectrice. Continuarea proiectului presupune analiza detaliata a proprietatilor termoelectrice in functie de

temperatura pe cele doua canale (de spin up si spin down), mai concret a coeficientului Seebeck, a conductibilitatii /rezistivitatii electrice si a conductibilitatii termice electronice pentru deformari tetragonale si triclinice ale celulei elementare primitive ale compusului CoFeZrSi, ce poate fi considerat un potential candidat pentru aplicatii termoelectrice imediate, ca material component in substraturi ale heterostructurilor epitaxiale

Titlu Faza: Proprietățile luminescente și magnetice ale materialelor nanostructurate multifuncționale dopate cu pământuri rare

Termen: 08/12/2019

Obiectivul: sinteza și caracterizarea materialelor nanostructurate multifuncționale dopate cu pământuri rare cu proprietăți luminescente și magnetice pentru posibile aplicații în imagistica medicală.

Pentru prepararea luminoforilor **LaF₃:Yb³⁺(4%)/Er³⁺(1%)** și **CeF₃:Tb³⁺(8%)** sub formă de pulbere fină nanocristalină s-a folosit metoda precipitării chimice, urmată de calcinare la 400°C.

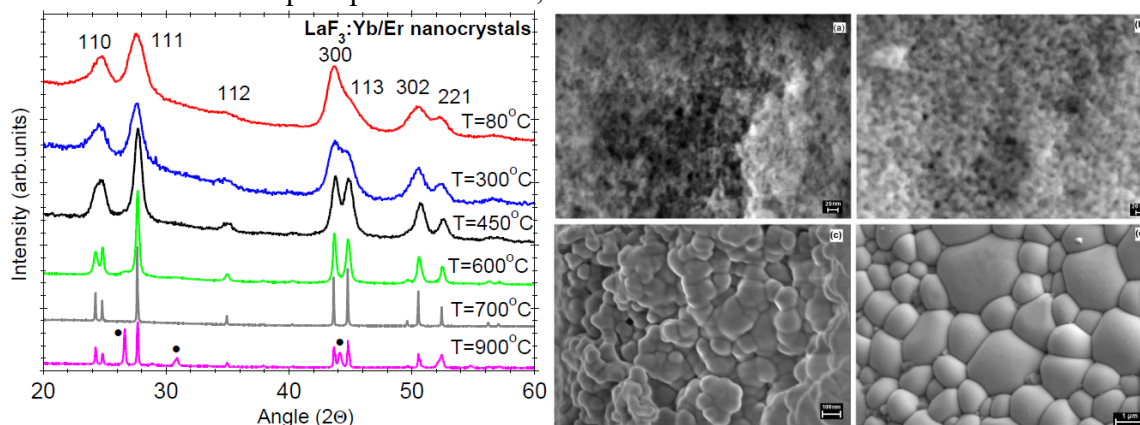


Figura 1 Difractogramele (XRD) (stânga) și imagini de microscopie SEM (dreapta)

Difractogramele inregistrate pe pulberii uscate nanocristaline de LaF₃:Yb / Er caldate la diferite temperaturi (Fig. 1 stânga) au arătat formarea fazei nanocristaline de LaF₃ și apariția fazei LaOF la 900°C. Din analiza SEM (Fig.1 dreapta) s-a observat o dependență a dimensiunilor nanocristalelor de temperatură, slabă până la 450°C (10-15nm), urmată de o creștere accentuată (dimensiuni de micrometri), pentru 700°C. Procesul de creștere a fost descris pe baza modelului de creștere de tip Ostwald, în care particulele mai mari cresc în detrimentul particulelor mai mici. Spectrele XPS au arătat maxime caracteristice lantanului (La3d5/2, 3d5/2) și fluorului (F1s1/2) la energii de legătură de aproximativ 837, 851 și respectiv 685 eV și au evidențiat un strat subțire de La și Er oxidat de aproximativ 1 nm la suprafața nanocristalelor, ionii de Yb fiind legați în principal de ionii de fluor. Sub pompare cu lumină laser de 980 nm, s-a observat luminescența UC „verde” ((²H_{11/2}, ⁴S_{3/2}) → ⁴I_{15/2}) și „roșie” (⁴F_{9/2} → ⁴I_{15/2}) datorită ionilor Er³⁺. Odată cu creșterea temperaturii de calcinare s-a observat o creștere progresivă a luminescenței UC datorită reducerii efectelor de stingere a suprafeței și creșterii fracției de ioni Er legați de fluor implicați în procesul de luminescență UC.

Folosind aceeași metoda s-au preparat pulberi nanocristaline de CeF₃, CeF₃:Tb³⁺ care după calcinare la 400°C au arătat formarea fazei nanocristaline de CeF₃. Imaginile de microscopie SEM au arătat prezența nanoparticulelor de CeF₃ de ordinul a 10-15nm. În spectrele de luminescență se observă benzile tipice ionului Tb³⁺ și asociate dezexcitațiilor de pe starea excitată ⁵D⁴ pe stările inferioare ⁷F_J. Curbele de magnetizare înregistrate la temperatură joasă (5 K) și la temperatura camerei (280K) au arătat ca proba este paramagnetică. Acest comportament se datorează exclusiv prezenței în structură a ionului Ce³⁺, pământurile rare fiind în general substanțe paramagnetice. S-a observat o evoluție atipică a magnetizării în funcție de temperatură, datorată cel mai probabil clusterizării nanoparticulelor cu dimensiuni de până la 10 nm.

Pentru prepararea luminoforului **LiYF₄ dopat cu Yb³⁺(4%)/Er³⁺(1%)** sub formă de pulbere nanocristalină s-a folosit precipitarea simultană și locală a nanofluorurilor de LiF și YF₃ în prezența solventului etilen glicol (în condiții obișnuite de atmosferă și temperatură) urmata de reacția în stare solidă dintre acestea la 450°C.

Difractogramele înregistrate au aratat formarea fazei nanocristaline de LiYF_4 la temperaturi mai mari de 500°C . Din imaginile de microscopie SEM s-a observat formarea nanoparticulelor aglomerate de aprox. 100 nm. Sub pompare cu lumină laser de 980 nm, probele au prezentat luminescență UC „verde” (${}^2\text{H}_{11/2}, {}^4\text{S}_{3/2} \rightarrow {}^4\text{I}_{15/2}$) și „roșie” (${}^4\text{F}_{9/2} \rightarrow {}^4\text{I}_{15/2}$) datorită ionilor Er^{3+} . În urma dopării cu Gd materialul prezintă proprietăți magnetice datorate momentelor magnetice ale ionilor Gd^{3+} asociate celor 7 electroni neîmperecheați din sub-nivelele 4f interioare. (Fig. 2)

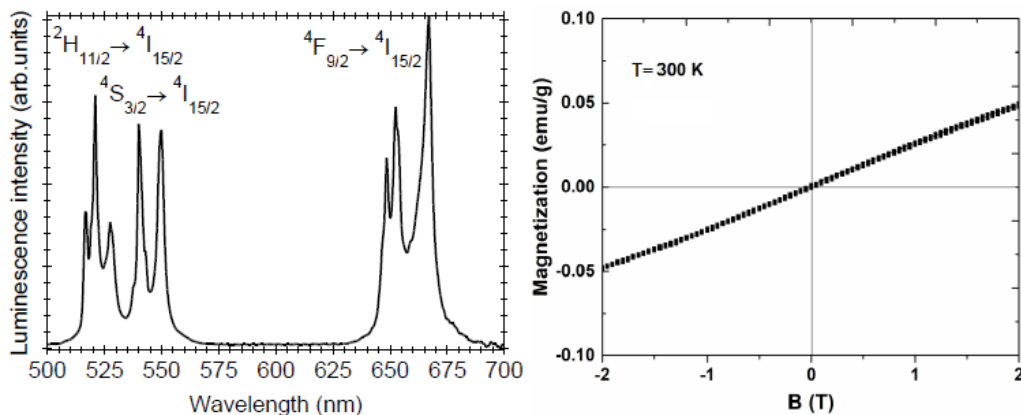


Figure 2. Spectrele de up-conversion (stânga) și curbele de magnetizare (dreapta)

Pentru prepararea **nanocristalelor BaCl_2 dopate cu Eu^{2+}** s-a folosit metoda sol gel urmată de descompunerea (termoliza) xerogelului rezultat la temperatura de $400\text{-}500^\circ\text{C}$. Analiza Rietveld a indicat o ușoară distorsiune a celulei iar dopantul afectează numai ionii de clor de prim ordin, vecini de Ba^{2+} . În spectrele de luminescență excitate cu UV sau X s-a observat o luminescență puternică la 402nm, asociată tranziției $4f^6 5d^1 \rightarrow {}^8\text{S}_{7/2}$ a ionului Eu^{2+} (Figura 3).

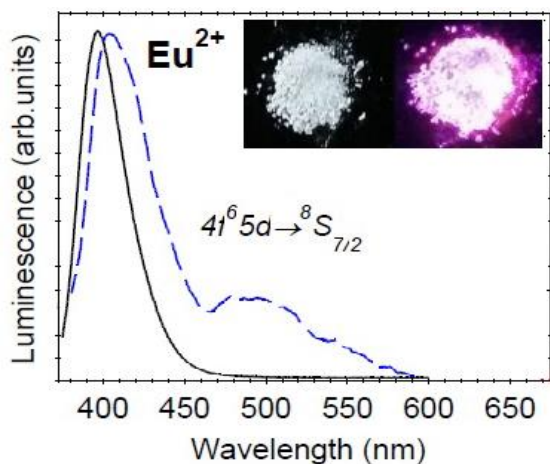


Figura 3. Spectrele de luminescență înregistrate la excitare cu radiație UV (curba continuă) și X (curba punctată); în inset este prezentată proba în lumină naturală și la excitare cu UV.

Pentru analiza procesului de dopare cu Eu^{2+} a nanocristalelor BaCl_2 s-a folosit spectroscopia RES în banda X și banda Q. Probele investigate fiind pulberi nanocristaline, majoritatea liniilor hiperfine nu pot fi distinse din cauza lărgirii liniei. Din simularea spectrelor s-au găsit parametrii: valoarea izotropă $g_{\text{iso}} = 1.99517$, constanta de cuplare izotropă hiperfină $A_{\text{iso}} = 42.4$ MHz, cu parametru de desplicare de câmp zero $B_{20} = 21$ MHz și $B_{22} = -493$ MHz.

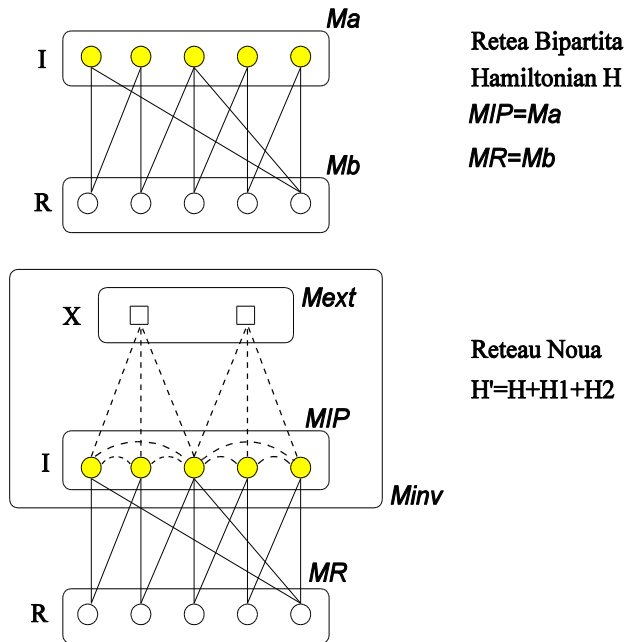
Titlu Faza: Studii spectrale si analiza fenomenelor de interferenta cuantica in sisteme bipartite.

Termen: 9/13/2019

Obiective: Studiul zerourilor functiilor Green si ale conductantelor electrice in retele de electroni si molecule.

Rezultate estimate initial: Dezvoltarea de metode pentru calcularea interferentelor distructive si ale zerourilor conductantei electrice in sisteme bipartite.

Metoda Punctelor de Interferenta



Rezultate obtinute: In lucrare am studiat existenta punctelor de interferenta si anulara conductantelor electrice la $E=0$ in retele care sunt descrise de Hamiltonieni fara interactie in aproximatia tight-binding. Sistemele studiate sunt molecule sau sisteme de doturi cuantice (molecule artificiale).

1. Mai întâi am definit punctele de interferenta M_{ip} la o energie data E in termenii elementelor de matrice ale functiei Green. Prin definitie existenta unui set de interferenta M_{ip} ne spune ca elementele de matrice ale functiei Green $G_{ij}(E) = 0$ la orice i,j din multimea M_{ip} . Exemplul de baza este acela al unei retele bipartite cu un Hamiltonian nesingular care are un set de puncte de interferenta la $E = 0$, care poate contine numai punctele uneia dintre cele doua subretele A sau B. In acest caz, propagarea unui electron cu energie zero intre doua puncte apartinand aceleiasi subretele, sau intoarcerea in punctul de pornire, se anuleaza din cauza termenilor de semn opus din dezvoltarea spectrala. Referindu-ne la transportul de electroni, cunoasterea unui set de puncte de interferenta ne ajuta sa identificam zerourile conductantei electrice cand firele de transport sunt conectate la punctele din multimea M_{ip} si implicit ne ajuta sa aflam interferentele distructive din

retea electronica. In acest fel prezentul studiu vine in completarea altor metode grafice existente folosite pentru a calcula zerourile conductantei electrice.

2. Cu ajutorul metodei prezentate putem construi noi molecule cu seturi cunoscute de puncte de interferenta. Vom porni de la un exemplu de baza al unui retele bipartite pentru care am ales un set de interferenta M_{ip} . Un lucru important, punctele ramase sunt numite puncte rigide R . Adaugam noi termeni care modifica retea initiala astfel incat nici o schimbare nu afecteaza nici unul dintre punctele rigide R . Vom obtine noi retele, care corespund unor noi molecule, care au acelasi set de puncte de interferenta M_{ip} .

3. Folosind metoda punctelor de interferenta, putem obtine seturile de interferenta si zerouri ale conductantelor pentru diferite retele si molecule. Aceeasi molecula poate avea mai multe seturi de interferenta cu diferite puncte de rigide cum este spre exemplu molecula de fulvena sau grafena. Zeroul unei conductante care provine dintr-un set dat M_{ip} ar putea fi modificat numai prin perturbarea punctele rigide. In acest fel suntem capabili sa intelegem zerourile conductantelor si proprietatile lor de invarianta pentru o anumita clasa de matrici simetrice.

Concluzii si perspective: Exista molecule (radialena, fulvena, molecule cu grafuri hexagonale sau retele precum grafena) pentru care toate zerourile conductantelor la $E = 0$ pote fi calculate folosind metoda punctele de interferenta (MPI) prezentata in aceasta lucrare. Dar exista si alte molecule (molecule biciclice, cum ar fi azulena) care au zerouri care nu pot fi obtinute cu MPI. Acest lucru poate fi studiat in viitor pentru a avansa in intelegerea interferentele distructive care apar in propagarea coerenta a electronilor prin molecule sau alte modele discrete.

Titlu Faza: Fenomene de capacitate negativa in structuri feroelectrice

Termen: 10/11/2019

Obiective: Studiul fenomenului de capacitate negativa in feroelectrici si heterostructuri care includ straturi feroelectrice

Rezultate estimate initial: se vor creste straturi subtiri feroelectrice in geometrie capacitor, precum si heterostructuri care includ cel putin un strat feroelectric; se vor realiza masuratori specifice de histerezis si capacitate. Se va incerca punerea in evidenta fenomenul de capacitate negativa ca efect tranzitoriu legat de reversarea polarizarii.

Rezultate obtinute (scurta descriere a celor mai importante rezultate, cu 1-2 imagini/grafice de impact care sustin rezultatele):

Capacitate negativa a fost raportata sin in multistraturi dielectric-feroelectric, observand ca capacitatea totala a structurii este mai mare decat valoarea ce ar rezulta aplicand formula pentru legare in serie a unor capacitori. In orice caz, in toate studiile anterioare fenomenul de capacitate negativa a fost raportat in situatii in care polarizarea feroelectrica este aproape de zero sau trece prin zero, asa cum este cazul la tranzitia de faza sau in timpul reversarii directiei de polarizare.

$$\varepsilon_f = \varepsilon_b + \frac{1}{\varepsilon_0} \frac{\partial P_s}{\partial E}$$

Ecuatia de mai sus sugereaza urmatoarele:

- Daca polarizarea spontana in feroelectric este saturata si nu mai variaza cu campul electric aplicat, atunci ε_f se reduce la ε_b .
- ε_f poate fi negativa daca derivata polarizarii spontane in raport cu campul electric aplicat este negativa (spre exemplu, polarizarea continua sa creasca atunci cand campul electric aplicat incepe sa scada).
- Dependenta de camp electric a constantei dielectrice se obtine derivand ciclul de histerezis al polarizarii (, cu alte cuvinte, caracteristica C-V ar trebui sa fie derivata curbei D-E sau P-E, in cazul in care termenul $\varepsilon_0 E$ in ecuatia (1) este neglijabil).

Predictiile teoretice de mai sus au fost verificate pe niste capacitori feroelectrici bazati pe straturi de PZT epitaxiale. Acestea au fost crescute prin PLD pe electrozi de SRO epitaxiali, cu grosime de 20 nm, crescuti la randul lor pe suporti monocristalini de STO. Grosimea stratului de PZT a fost estimata la circa 200 nm din imagini TEM, iar electrozii superiori au fost tot din SRO cu o arie de 0.01 mm².

Verificarea a constat in inregistrarea curbelor de histerezis si la tensiuni sunb tensiunea corectiva si la tensiuni ceva mai mari decat acestea. Practic, amplitudinea pulsurilor triangulare de tensiune a fost crescuta treptata, de la o curba de histerezis la alta, pana s-a obtinut ceea ce se poate numi „deschiderea curbei de histetrezis”. Curbele de polarizare si curent inregistrate in acest fel sunt prezentate in Figura 1.

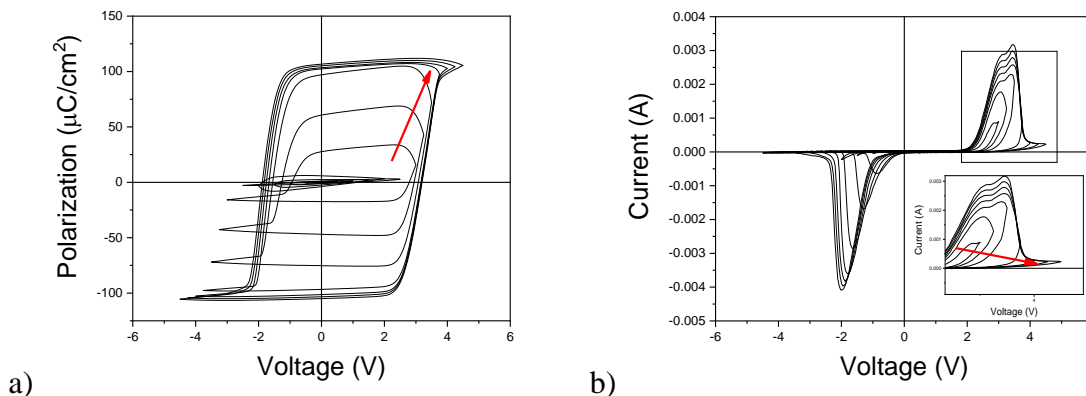


Fig. 1 a) deschiderea curebie de histerezis a polarizarii obtinuta prin cresterea pas cu pas a amplitudinii pulsurilor triangulare de tensiune aplicate pe proba (sageata rosi marcheaza sensul de crestere); b) histerezisul in curent (in inset se arata marita zona marcata cu triunghi in graficul principal, iar sageata rosie indica sensul de crestere a amplitudinii pulsurilor trangularare de tensiune).

Rezultatele rezultate din acest studiu sugereaza ca, in straturi subtiri feroelectrice de calitate epitaxiala foarte ridicata, reversarea polarizarii este brusca, fara trecere prin stari intermediare caracterizate de existenta domeniilor feroelectrice cu orientari aleatoare, asa cum se postula pana in prezent. Aceasta descoperire este in concordanta cu harta energiei libere in faza feroelectrica, care are doar doua minime posibile, corespunzatoare celor doua orientari ale polarizarii. Se deduce ca nu sunt posibile alte stari ale polarizarii, decat cele doua corespunzatoare miniminelor energetice.

Concluzii si perspective:

A fost pus in evidenta efectula de capacitate negativa in condensatori feroelectrici, prezent ca efect tranzitoriu in timpul reversarii polarizarii. Capacitatea negativa are un maxim pronuntat atunci cand polarizarea trece prin zero, iar valoarea acestui maxim depinde de tensiune. Transformand dependenta de tensiune in dependenta de timp se poate estima timpul real de reversare a polarizarii. Studiul va fi continuat cu alte experimente care sa elucideze originea efectului de capacitate negativa.

Titlul Fazei: Sinteza de nanoparticule încărcate pe suprafețe feroelectrice și studiul in situ al reactivității acestor suprafețe.

Termen: 10/11/2019

Obiective: Se urmărește sinteza de nanoparticule din metale nobile cu proprietăți catalitice, pe suprafețe feroelectrice și caracterizarea lor complexă, inclusiv în raport cu chimismul specific acestora

Rezultate estimate inițial: Obținerea de probe feroelectrice cu suprafață curată, caracterizarea lor compozițională și din punct de vedere al stării de polarizare prin spectroscopie de fotoelectroni (XPS, UPS), structural, prin difracție de electroni (LEED, RHEED), depunerea de metale nobile cu proprietăți catalitice, caracterizarea stării de încărcare prin XPS și UPS și studiul in situ al adsorbției și desorbției de molecule simple pe aceste suprafețe, prin spectroscopie de fotoelectroni cuplată cu spectrometrie de masă.

Rezultate obținute (scurtă descriere a celor mai importante rezultate, cu 1-2 imagini/grafice de impact care susțin rezultatele):

Reacțiile de suprafață care implică monoxidul de carbon sunt de mare interes, din cauza nocivității acestei molecule, a necesității de a o elimina din gazele de eșapament sau de a o transforma în combustibili prin sinteza Fischer-Tropsch sau prin metanare [1]. Materialele ferroelectrice, a căror polarizare poate fi schimbată cu ușurință de parametri externi (câmpuri electrice, tensiune sau temperatură), oferă capacitatea de a modula energiile de adsorbție sau de desorbție [2,3]. Activitatea chimică și catalitică a suprafețelor ferroelectrice este cercetată în mod activ de aproape două decenii [4,5]. Catalizatorii „tradiționali” pentru reacțiile legate de CO sunt metalele nobile (Pd, Pt), datorită, în principal, transferului de sarcină complex (donare de la electronii σ la metal, retro-donare a electronilor d din metal în orbitalii antibonding π^*) care apare atunci când CO este adsorbit pe ele [6]. O alegere naturală este combinarea metalelor nobile cu suprafețele ferroelectrice, ceea ce s-a făcut în acest studiu. Au-ul este depus pe suprafețe de zirconat de plumb (Pb(Zr,Ti)O₃(001)), cu polarizare spre interior, atomic curate, apoi experimentele de adsorbție și desorbție a monoxidului de carbon sunt investigate *in situ* prin spectroscopie de fotoelectroni folosind radiația de sincrotron (fig. 1). Pb(Zr,Ti)O₃(001) este preparat prin depuneri laser pulsate pe un monocristal de titanat de stronțiu. Primul pas, pentru a obține rezultate optime, este obținerea suprafețelor atomic curate. Microscopia de forță atomică și spectroscopia de fotoelectroni cu rezoluție înaltă sunt în concordanță privind formarea nanoparticulelor de dimensiunea 50-100 nm, iar nivelul profund al Au-lui indică o stare de încărcare negativă. În cazul unui experiment similar efectuat pe zirconat de plumb ferroelectric cu o stare de polarizare similară și fără Au depus, s-a aratat că acoperirea de saturare după expunerea la monoxid de carbon crește cu 68 % și aproape tot carbonul adițional este găsit fiind într-o stare de oxidare. Experimentele de desorbție, urmărite *in situ* prin spectroscopie de fotoelectroni, sunt investigate în funcție de temperatură. Se pare că adsorbția de carbon neutru este strict legată de starea de polarizare a filmului ferroelectric, în timp ce carbonul găsit sub forma de CO este atribuit adsorbției pe nanoparticulele metalice. XPS-ul, prin capacitatea sa de a discrimina între diferitele stări ionice sau de legătură ale atomilor sau moleculelor de suprafață [7,8] combinată cu capacitatea de a obține curbura benzilor de suprafață și de a evalua local stările de polarizare [9–14] este instrumentul ideal pentru aceste investigații. Tabelul 1. Raporturi de intensitate atomică obținute din niveluri profunde reprezentate în Figura 1, după normalizarea cu intensitatea fasciculului și secțiunile transversale de fotoemisie atomice.

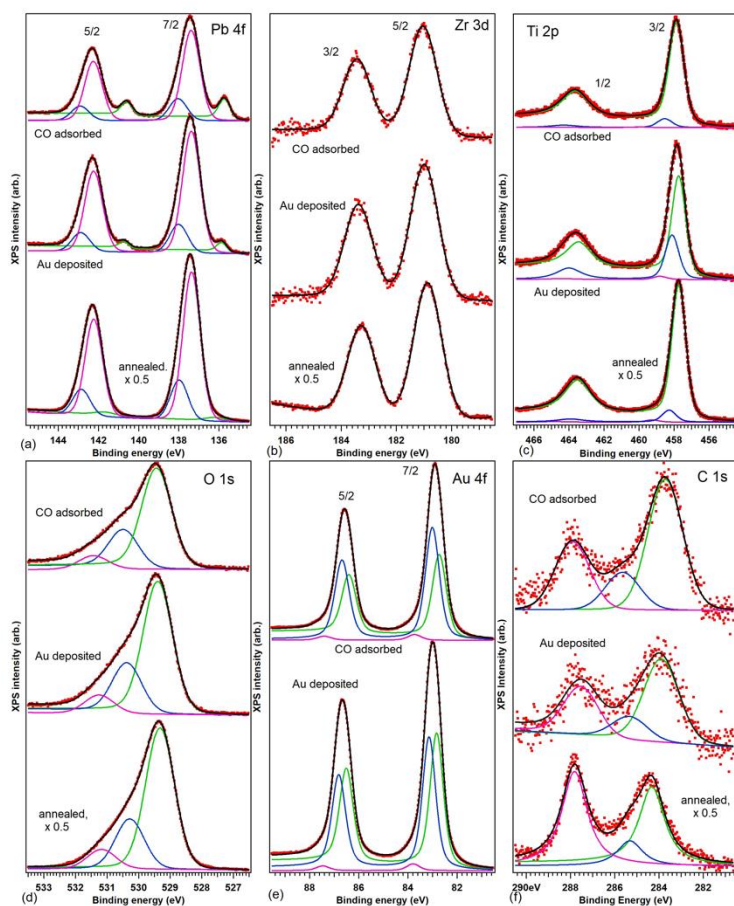


Fig. 1 Spectre XPS obținute folosind radiația de sincrotron după depunerea a 1 nm Au și după dozarea a 45.000 Langmuir de CO pe heterosuprafață: (a) Pb 4f, (b) Zr 3d, (c) Ti 2p, (d) O 1s, (e) Au 4f, (f) C 1s.

Probă	Raport atomic	Pb/(Zr + Ti)	Zr/(Zr + Ti)	O/(Zr + Ti)	Au/Pb	C/Pb
PZT(001) tratat termic		2.58	0.200	3.56	-	0.254
1 nm Au depus		1.52	0.206	3.52	2.95	0.347

45 kL CO dozat	1.39	0.200	3.32	2.98	0.712
----------------	------	-------	------	------	-------

Concluzii si perspective:

- depunerea de Au pe suprafețe de Pb(Zr,Ti)O₃(001), polarizate spre interior, conduce la formarea de nanoparticule încărcate negativ
- îmbunătățirea adsorbției de CO la temperatura camerei prin decorarea cu nanoparticule de Au a probelor de Pb(Zr,Ti)O₃(001)
- majoritatea carbonului redus pare să fie absorbit doar pe zonele de suprafață curată.
- posibile efecte sinergice ale nanoparticulelor metalice și substratelor feroelectrice ar putea fi: (i) pentru substrat, stabilizarea unei polarizări mai pronunțate în materialul feroelectric prin ecranarea extrinsecă oferită de nanoparticulele metalice; (ii) pentru nanoparticule, inducerea stării de încărcare negativă care ar putea influența legăturile de carbonil
- toate obiectivele au fost realizate în conformitate cu tema programului de lucru
- rezultatele obținute au fost diseminate sub forma unei lucrări trimise spre publicare într-o revistă cotate ISI: Nicoleta G. Apostol, Marius A. Hușanu, Daniel Lizzit, Ioana A. Hristea, Cristina F. Chirilă, Lucian Trupină, Cristian M. Teodorescu, CO adsorption, reduction and oxidation on Pb(Zr,Ti)O₃(001) surfaces decorated with negatively charged gold nanoparticles, Catal. Today, trimis pe data de 22 august 2019.

Referințe: [1] K.W. Kolasinski, Surface Science. Foundations of Catalysis and Nanoscience, Third Edition, Wiley, Chichester, 2012; [2] A. Kakekhani, S. Ismail-Beigi, ACS Catal. 5 (2015) 4537–4545; [3] C.Y. Chao, Z.H. Ren, Y.H. Zhu, Z. Xiao, Z.Y. Liu, G. Xu, J.Q. Mai, X. Li, G. Shen, G.R. Han, Angew. Chem. Int. Ed., 51 (2012) 9283–9287; [4] A.M. Kolpak, I. Grindberg, A.M. Rappe, Phys. Rev. Lett., 98 (2007) 166101(1–4); [5] S. Kim, M. Rutenberg Schoenberg, A. M. Rappe, Phys. Rev. Lett. 107 (2011) 076102(1–4); [6] M.A. Khan, M.A. Nadeem, H. Idriss, Surf. Sci. Rep. 71 (2016) 1–31; [7] L.E. Ștoflea, N.G. Apostol, L. Trupină, C.M. Teodorescu, J. Mater. Chem. A 2 (2014) 14386–14392; [8] C.M. Teodorescu, L. Pintilie, N.G. Apostol, R.M. Costescu, G.A. Lungu, L. Hrib, L. Trupină, L. C. Tănase, I.C. Bucur, A.E. Bocîrnea, Phys. Rev. B 96 (2017) 115438(1–15); [9] L.C. Tănase, N.G. Apostol, L.E. Abramiuc, C.A. Tache, L. Hrib, L. Trupină, L. Pintilie, C.M. Teodorescu, Sci. Rep. 6 (2016) 35301(1–18); [10] E. Ramos-Moore, J.A. Baier-Saip, A.L. Cabrera, Surf. Sci. 600 (2006) 3472–3476; [11] Y. Yun, L. Kampschulte, M. Li, D. Liao, E.I. Altman, J. Phys. Chem. 111 (2007) 13951–13956; [12] Y. F. Cui, J. Briscoe, S. Dunn, Chem. Mater. 25 (2013) 4215–4223; [13] E.S. Beh, S. A. Basun, X.F. Feng, I.U. Idehenre, D.R. Evans, M.W. Kanan, Chem. Sci. 8 (2017) 2790–2794; [14] L.C. Tănase, L.E. Abramiuc, C.M. Teodorescu, AIP Conf. Proc. 1916 (2017) 030001(1–10).

Titlu Faza: Dezvoltarea modelului teoretic de conductie pentru filme compacte de oxizi metalici semiconductori cu aplicatii in detectia de gaze.

Termen: 11/14/2019

Obiective:

Determinarea dependentei conductantei electrice de parametrii intrinseci (lungimea Debye) si geometrici (grosimea D a filmelor compacte) pentru cazurile oxizilor metalici semiconductori *n* si *p* (*n*MOS si *p*MOS).

Rezultate estimate initial:

Determinarea modului in care are loc traducerea interactiilor de suprafata in raport cu caracterul semiconductor si nivelul energetic al potentialului de suprafata (V_s).

Rezultate obtinute:

Conductanta totala a unui strat senzitiv compact poate fi scrisa ca suma dintre conductanta G_s a stratului de suprafata (expusa atmosferei inconjuratoare) si conductanta G_b de volum (inacesibila gazelor de test). Daca conductanta de suprafata sufera modificari determinate de prezenta gazelor de test, conductanta de volum poate varia doar in domeniul temperaturilor ridicate de operare de peste 700°C, motiv pentru care aceasta urma poate fi considerata constanta.

$$G_{total} = G_s + G_b$$

Considerand parametrii geometrici ai probei (Figura 1), ecuatia de mai sus devine:

$$G_{total} = \tilde{\sigma}_s \frac{z_0 W}{L} + \sigma_b \frac{(D-z_0)W}{L}$$

unde: L este lungimea stratului compact, W este latimea, D este grosimea iar z_0 este grosimea stratului (zonei) de suprafata. $\tilde{\sigma}_s$ este conductivitatea electrica medie a stratului de suprafata in timp ce σ_b este conductivitatea de volum.

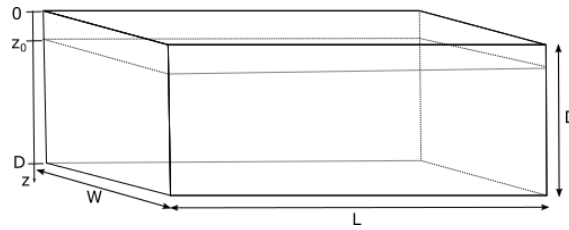


Figura 1. Reprezentarea unui strat MOS compact si parametrii geometrici asociati.

In cazul unui n MOS unde efectele de suprafata nu se extind in tot volumul materialului dependenta conductantei totale de potentialul de suprafata se scrie ca:

$$G_{total} = G_b \left[1 \pm \sqrt{2} \frac{L_D}{D} \left[\exp\left(-\frac{eV_s}{k_B T}\right) + \frac{eV_s}{k_B T} - 1 \right]^{1/2} \right]$$

In Figura 2a este prezentata dependenta conductantei normalizate a stratului compact, in functie de variatia potentialului de suprafata in raport cu energia termica pentru valori diferite ale lungimii Debye (L_D). Valorile pozitive ale raportului $eV_s/k_B T$ sunt asociate cu aparitia unei zone de saracire, iar valorile negative cu aparitia unui strat de acumulare de sarcina la suprafata n MOS.

In cazul unui p MOS expresia conductantei generale este:

$$G_{total} = G_s + G_b \sim \tilde{p}_s z_0 + p_b (D - z_0)$$

unde: termenul $\tilde{p}_s z_0$ reprezinta contributia efectelor de suprafata iar termenul $p_b (D - z_0)$ reprezinta contributia volumului materialului gaz-senzitiv.

Urmand aceeasi abordare matematica ca in cazul n MOS, obtinem:

$$G_{total} = G_b \left[1 \pm \sqrt{2} \frac{L_D}{D} \left[\exp\left(\frac{eV_s}{k_B T}\right) - \frac{eV_s}{k_B T} - 1 \right]^{1/2} \right]$$

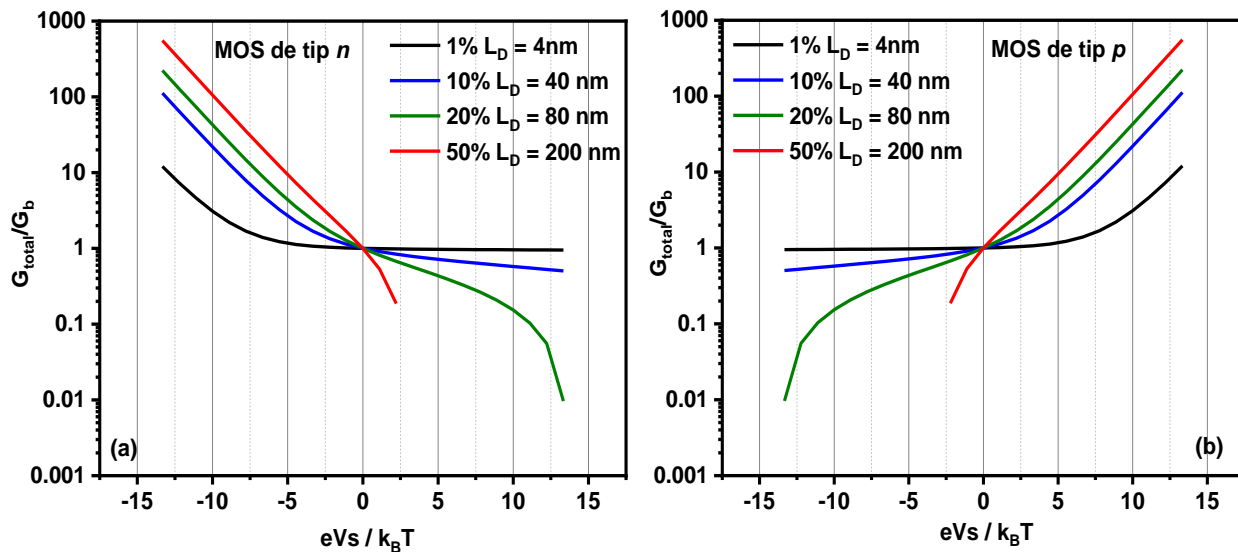


Figura 2. Variatia conductantei normalizate functie de potentialul de suprafata pentru patru situatii diferite ale raportului L_D/D ; (a) stratul compact n MOS; (b) stratul compact p MOS

In Figura 2b este prezentata dependenta conductantei normalizate a stratului compact in functie de variatia potentialului de suprafata in raport cu energia termica pentru valori diferite ale lungimii Debye. Valorile negative ale raportului $eV_s/k_B T$ sunt asociate cu aparitia unei zone de saracire, iar valorile pozitive cu aparitia unui strat de acumulare de sarcina la suprafata p MOS.

Concluzii si perspective:

Studiul de fata demonstreaza ca traducerea interactiilor de suprafata are loc in mod diferit functie de natura caracterului semiconductor al materialului gaz-senzitiv cat si functie de proprietatile intrinseci (lungime Debye – L_d) si geometrice (grosimea filmului D) ale acestuia.

In cazul unui n MOS, stratul de acumulare de sarcina induce o dependenta exponentiala a conductantei normalizate, pentru valori mici ale potentialului de suprafata (V_s) si lungimi Debye (L_D) mari, in timp ce in cazul unui strat de saracire la suprafata, doar valori de peste 10% ale lungimii Debye produc modificari majore in conductanta normalizata.

In cazul unui p MOS, variatiile conductantei normalizate respecta acelasi profil, inasa stratul de acumulare de sarcina apare pentru valori pozitive ale raportului $eV_s/k_B T$, iar stratul de pentru valori negative ale aceluiasi raport.

Cercetarile viitoare vor aborda descrierea teoretica a legaturii dintre componenta de receptor si cea de traductor in cazul filmelor gaz-senzitive compacte de tip n MOS si p MOS, respectiv dependenta conductantei totale de concentratia gazului de interes aplicativ.

Titlu Faza: Studii ale materialelor nanostructurate cu proprietati magnetice dure, obtinute in sisteme fara pamanturi rare.

Obiective: Realizarea de studii teoretice si experimentale pentru identificarea, conceperea, designul, sinteza si caracterizarea de materiale magnetice fara pamanturi rare, capabile sa satisfaca cerintele pentru actualii magneti permanenti.

Rezultate estimate initial:

- identificarea si realizarea specificatiilor pentru realizarea de sisteme binare sau ternare ce prezinta faze $L1_0$ tetragonale
- conceperea si designul structurii prin realizarea de optimizari compositionale si adaugarea de elemente substitutionale
- sinteza prin metode de neechilibru a probelor din sisteme cu faze $L1_0$, metode ce pot prezerva structuri de faze posibile, conform diagramelor de faza, doar in starea lichida, de exemplu prin solidificare ultrarapida din topitura – melt spinning
- caracterizarea complexa termic-diferentiala, structurala si magnetica a aliajelor obtinute sub forma de benzi nanocristaline
- evidentierea prezentei fazelor tetragonale $L1_0$ si determinarea proprietatilor magnetice ale acestora

Materialele de tip magneti permanenti cu performante inalte sunt caracterizate de anizotropia magnetica superioara ($K_u=1,7\text{MJ/m}^3$), temperatura Curie inalta ($T_C \sim 1000\text{K}$) si produs energetic maxim $(BH)_{\max} \sim 110\text{kJ/m}^3$. Aceste materiale sunt utilizate intr-o gama larga de aplicatii tehnologice. Primele aliaje cu faze tetragonale $L1_0$ cu proprietati magnetice asemanatoare magnetilor permanenti au fost realizate din sistemele binare FePt si CoPt. In ciuda proprietatilor magnetice semnificativ crescute, costul prohibitiv al materiei prime a impiedicat dezvoltarea ulterioara a acestei clase de magneti pentru aplicatii industriale.

Printre sistemele cu costuri mult mai reduse ce pot realiza faza ordonata tetragonala $L1_0$ se numara aliajele Mn-Al, Fe-Ni sau Mn-Bi. Aliajul MnAl cristalizeaza in mai multe faze, depinzand de stoichiometria aliajului si de temperaturile de formare. Intre acestea, faza τ -MnAl sau $L1_0$ este de simetrie tetragonala, are proprietati magnetice bune din punct de vedere teoretic, cu magnetizare de saturatie de $114 \text{ Am}^2/\text{Kg}$, anizotropie

magnetocristalina uniaxiala $K_1 = 1.5 \text{ MJ/m}^3$ si temperatura Curie ridicata $T_c = 650 \text{ K}$. Aceasta faza $L1_0$ se poate obtine ulterior procedurii de sinteza, din faza hexagonala non-magnetica ϵ prin tratament termic ($400\text{-}700^\circ\text{C}$) al aliajului obtinut. Adaugarea unei cantitati mici de carbon stabilizeaza faza τ si previne descompunerea acesteia in faze nedorite, creste coercivitatea si faciliteaza obtinerea unui material cu anizotropie imbunatatita.

Toate probele au fost caracterizate prin difractie de raze X (XRD), cinetica transformarii fazelor pentru benzile as cast obtinute a fost investigata prin calorimetrie diferentiala cu ajutorul unui dispozitiv DSC si masuratorile magnetice au fost realizate cu ajutorul unei facilitati SQUID in camp aplicat de 4T, paralel pe planul benzii.

Pe baza rezultatelor obtinute in DSC, am putut identifica temperaturile de tranzitie la faza ordonata $L1_0$. Avand in vedere aceste rezultate, se pot identifica si temperaturile necesare pentru tratamentul termic, astfel incat sa se poata forma cu preponderenta faza tetragonală de interes.

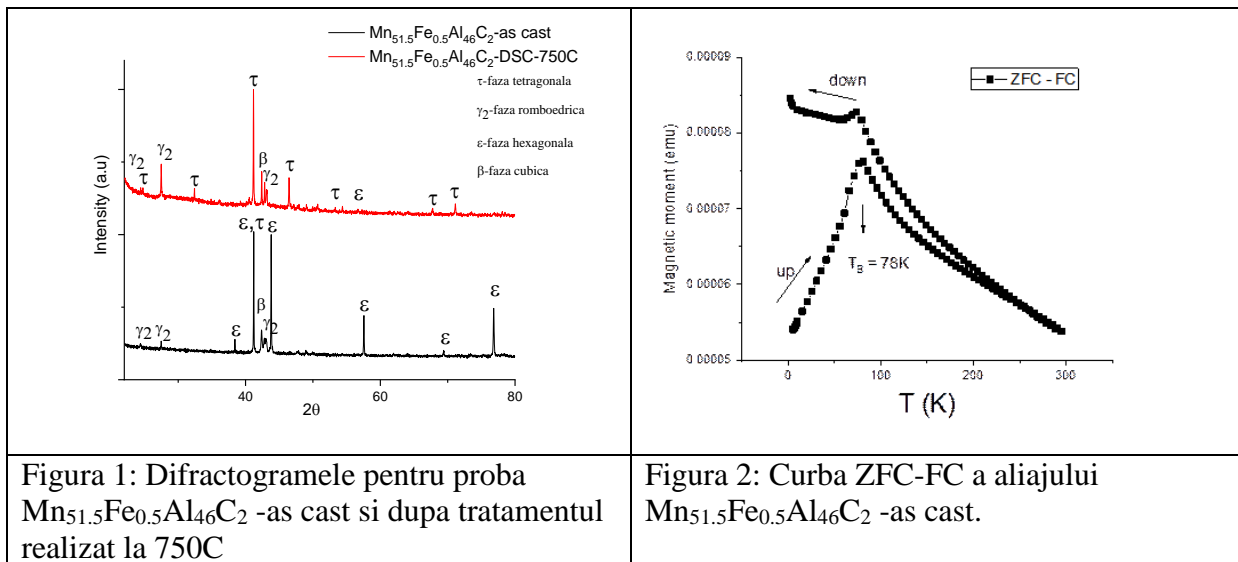


Figura 1: Difractogramele pentru proba $\text{Mn}_{51.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Al}_{46}\text{C}_2$ -as cast si dupa tratamentul realizat la 750C

Figura 2: Curba ZFC-FC a aliajului $\text{Mn}_{51.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Al}_{46}\text{C}_2$ -as cast.

In figura 1 se prezinta comparativ difractogramele pentru proba $\text{Mn}_{51.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Al}_{46}\text{C}_2$ as-cast si tratata la 750C . In probele as-cast se observa formarea preponderenta a fazei ϵ insotita de fazele γ_2 (faza romboedrica) si faza β (faza cubica). In proba tratata se diminueaza pana la disparitie liniile Bragg ale fazei ϵ si cresc intensitatile liniilor fazei tetragonale τ . Aceasta lucru indica faptul ca in urma tratamentului termic efectuat in cadrul masurarii DSC faza de echilibru ϵ se descompune in faza tetragonală de interes τ care devine faza predominanta. Picuri Bragg de mica intensitate indica si prezenta fazelor romboedrica si cubica dar intr-o proportie mult redusa, comparativ cu cea tetragonală.

Caracterul feromagnetic al aliajelor investigate a fost pus in evidenta prin realizarea curbelor de magnetizare de tip zero-field-cooled – field-cooled ZFC-FC realizate in camp aplicat de 100 Oe in proba $\text{Mn}_{51.5}\text{Fe}_{0.5}\text{Al}_{46}\text{C}_2$ -as cast (fig. 2). La cresterea temperaturii dinspre 5K catre 300K (ramura „up”) magnetizarea creste treptat si atinge un maxim ascutit la cca 78K, dupa care magnetizarea descreste gradual. Pe ramura de descrestere (ramura „down”), alura curbei este similara pana la valoarea de 78K, dupa care magnetizarea se stabilizeaza la valori nenule ale magnetizarii probei. Aceasta saturare la valori nenule, indica realizarea alinierii spinilor la temperaturi sub 78K, si deci existenta caracterului ordonat al spinilor, caracteristic feromagnetismului.

Concluzii si perspective:

- Realizarea a doua aliaje din clasa de magneti permanenti fara pamanturi rare ce prezinta faza $L1_0$, aliaje realizate cu materiale cu costuri mult mai scazute decat cele clasice de tip FePt. Compozitia aliajelor a fost optimizata plecand de la aliajul quasi-echiatomic Mn-Al cu adaos de C (2 at%) pentru facilitarea aparitiei fazei tetragonale
- Punerea in evidenta prin difractie de radiatie x a transformarii de faza, in urma tratamentului termic.

- Punerea in evidenta a caracterului feromagnetic prin evidentierea ordonarii magnetice la temperaturi scazute cu moment magnetic nenul

In continuarea proiectului, vor fi realizate tratamente termice optimizate, alese in urma rezultatelor DSC, vor fi efectuate studii detaliate ale proprietatilor magnetice cu evidentierea parametrilor de interes, precum si studii detaliate de spectroscopie Mossbauer pentru evidentierea structurilor de spin si a parametrilor hiperfini, parametri magnetici esentiali pentru incadrarea aliajelor studiate in clasa de potentiali magneti fara pamanturi rare.

Titlu Faza: Termodinamica proceselor de comutare a polarizarii feroelectrice: aplicarea modelului Landau-Ginzburg-Devonshire pentru structuri multistrat cu aplicatii in memorii cu stari multiple

Obiective: Studiarea structurilor de tip feroelectric-izolator-feroelectric (FIF) pentru determinarea proceselor de comutare a polarizării feroelectrice folosind modelul termodinamic Landau-Ginzburg-Devonshire (LDG). Rezultatele teoretice obținute vor fi comparate cu date experimentale măsurate pe structuri metal-feroelectric-metal.

Rezultate estimate initial: Explicarea procesului de comutare a polarizării în structurile de tip FIF ce prezintă stări de polarizare multiple. Dependentă apariției stărilor multiple de polarizare în funcție de constanta dielectrica a stratului izolator, de grosimea straturilor de feroelectric și a parametrilor modelului LGD.

Rezultate obtinute (scurta descriere a celor mai importante rezultate, cu 1-2 imagini/grafice de impact care sustin rezultatele):

În cadrul acestei faza s-au studiat proprietatile structurilor FIF și condițiile în care apar stările multiple de polarizare. În acest scop s-a folosit modelul termodinamic LGD care descrie densitatea volumica a potențialul Gibbs al unui strat component astfel:

$$g(T, \vec{E}, \rho) = -\frac{1}{2} \epsilon E^2 - PE + \frac{1}{2} \alpha P^2 + \frac{1}{4} \beta P^4 + \dots \quad (1)$$

Unde P este polarizarea stratului, E este câmpul electric din stratul respectiv iar α și β sunt parametri de fit legați de proprietățile materialelor studiate. Pentru stratul izolator intermediar, polarizarea este zero iar Ec. (1) se reduce doar la primul termen. Potențialul Gibbs pentru structura FIF se scrie ca o suma a celor trei componente:

$$G(T, V_a) = v_1 g(T, E_1) + v_i g(T, E_i) + v_2 g(T, E_2), \quad (2)$$

unde, v_1 , v_i și v_2 sunt volumele părților constituate, iar E_1 , E_i și E_2 sunt câmpurile electrice corespunzătoare atunci când pe structura FIF este aplicata o tensiune V_a . Câmpurile electrice în fiecare strat pot fi obtinute rezolvand o problemă electrostatica iar polarizarile din cele doua straturi feroelectrice rezulta din impunerea simultana a conditiei de minim în Ec. (2).

In Figura 1 este prezentata evolutia polarizarii totale si evolutia polarizarilor straturilor constituate pe parcursul switching-ului, in cazul unei structure FIF ce prezinta 4 stari stabile de polarizare. De asemenea, polarizarea totala a structurii poate descrie si doua cicluri de histerezis intermediare ce se pot obtine astfel: din starea de reversare totala a polarizarii în cele doua straturi feroelectrice, obtinuta prin aplicarea unei tensiuni maxime, se variaza câmpul aplicat pana ce se obtine reversarea polarizarii doar într-unul dintre straturile feroelectrice. Continuarea cresterii campului aplicat in acelasi sens va determina comutarea polarizarii si in celalalt strat feroelectric, determinand astfel un ciclu complet de histeresis. Daca dupa prima reversare a polarizarii, campul aplicat se reduce la zero, starea aceasta intermediara ramane stabila. Scazand in continuare campul aplicat, are loc back-switchingul polarizarii la o tensiune mult mai mica, in comparatie cu tensiunea coercitiva din histerezisul complet. Rezulta astfel un histerezis intermediar puternic deplasat pe axa tensiunii. Similar, un al doilea ciclu de histerezis intermediar se obtine plecand de la o starea initiala cu polarizarea orientata in sens invers în ambele straturi feroelectrice. Dar acest al doilea ciclu de histerezis intermediar va avea o deplasare inversa pe axa tensiunii in comparatie cu primul. Aceste caracteristici sunt specifice pentru aceste structuri FIF ce prezinta un switching in trepte si se datoreaza cuplajului electrostatic dat de prezenta stratului izolator intermediar. Un rezultat asemanator se obtine și experimental, masurand o structura de tip

$Pb(Zr_{20},Ti_{80})O_3 - BaTiO_3 - Pb(Zr_{20},Ti_{80})O_3$. In Figura 1 este evidentiat ciclul complet de switching al polarizarii, precum si cele doua cicluri intermediare ce prezinta un imprint cu orientare opusa.

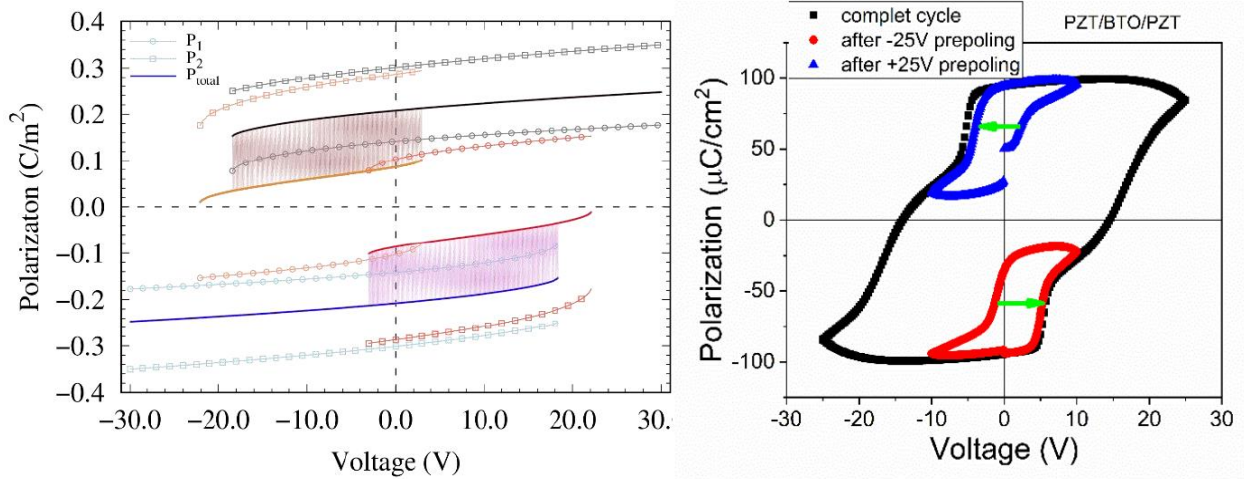


Figure 1: Evolutia polarizarii totale si a polarizarilor din straturile feroelectriceconstituente in functie de tensiunea aplicata modelata teoretic (figura din stanga); Curbele de histerzis total si partial in functie de starea de pre-polare, masurate pe o structura $Pb(Zr_{20},Ti_{80})O_3-BaTiO_3-Pb(Zr_{20},Ti_{80})O_3$

Concluzii si perspective:

Rezultatele obtinute in aceasta faza de proiect nucleu se inscriu, ca o continuare a eforturilor teoretice si experimentale de studiere a structurilor de tip feroelectric-izolator-feroelectric cu scopul de a optimiza obtinerea de stari multiple de polarizare stabile. Obiectivele fazei au avut ca scop intelegerea mecanismelor de reversare a polarizarii si de aparitie a starilor multiple în structuri feroelectric-izolator-feroelectric. Toate obiectivele au fost indeplinite, rezultatele studiului teoretic fiind coroborate de masuratori experimentale. Avand in vedere ca realizarea unor aplicatii avansate, cum sunt memoriile feroelectrice cu stari multiple si o larga gama de jonctiuni tunel feroelectrice implica utilizarea unor structuri de tip condensator feroelectric, apreciem ca rezultatele raportate in aceasta faza pregatesc atat teoretic cat si experimental posibilitatea fabricarii in viitor a unor prototipuri de memorii cu stari multiple. Propunem astfel continuarea temei privind studiul polarizarii in sisteme pentru dispozitive nanometrice prin evaluarea acestei marimi fizice in heterostructuri si super-retele cu moduri feroice cuplate.

Titlu Faza: Nanofibre polimerice functionalizate cu TiO_2 si ZnO pentru aplicatii de fotocataliza

Termen: 11/14/2019

Obiective:

- Obtinerea prin procesul de electrospinning de nanofibre care sa incorporeze nanoparticule de TiO_2 si ZnO ;
- Gasirea concentratiilor optime de nanoparticule dopante pentru a obtine nanofibre cu proprietati fotocatalitice;
- Caracterizarea din punct de vedere morfologic, structural si optic a nanofibrelor electrofilate dopate cu TiO_2 si ZnO .

Rezultate estimate initial: Studiul isi propune obtinerea, prin procesul de electrospinning, a unor nanofibre polimerice cu proprietati fotocatalitice prin incorporarea in acestea de nanoparticule de TiO_2 si ZnO . Procesul de fabricare va fi optimizat in functie de concentratia de nanoparticule folosita, urmand a fi stabilita compozitia optima pentru obtinerea unui proces proces de fotocataliza eficient. In cadrul studiului se vor caracteriza nanofibrele polimerice optinute din punct de vedere morfologic, structural si optic si de asemenea vor fi evaluate proprietatile de fotocataliza ale acestor nanofibre.

Rezultate obtinute: Electrofilarea este o metodă prin care se pot crea straturi de fibre polimerice cu diametre submicronice, folosind un câmp electrostatic și soluții de polimeri. Materialul fibros creat prin electrofilare este

caracterizat de o suprafață specifică foarte mare, datorită microstructurării implicite. Metoda este simplă, versatilă și oferă multiple căi de a funcționa fibrele obținute cu ajutorul altor materiale, cea mai facilă cale fiind adăugarea unor aditivi în soluția din care se electrofilează. Acești aditivi pot fi substanțe și materiale active, sau precursorii acestora, care devin fixate în matricea polimerică a fibrelor și preiau proprietățile morfologice ale acestora. În cazul materialelor oxidice cu proprietăți fotocatalitice, ambele căi de funcționare pot fi folosite pentru a obține materiale hibride.

Au fost fabricate fibre polimerice prin electrofilare de soluții de 12% wt. de polimetilmetacrilat (PMMA) în dimetilformamidă (DMF) dopate cu ZnO (1% wt), TiO₂ (1% wt) și amestec ZnO (0,5% wt)+TiO₂ (0,5% wt). Fibrele au fost caracterizate din punct de vedere structural prin difracție de raze X (XRD), morfologic cu ajutorul microscopiei electronice de baleiaj (SEM), precum și din punct de vedere optic folosind spectroscopia de reflexie (R%) și spectroscopia de fotoluminescență (PL).

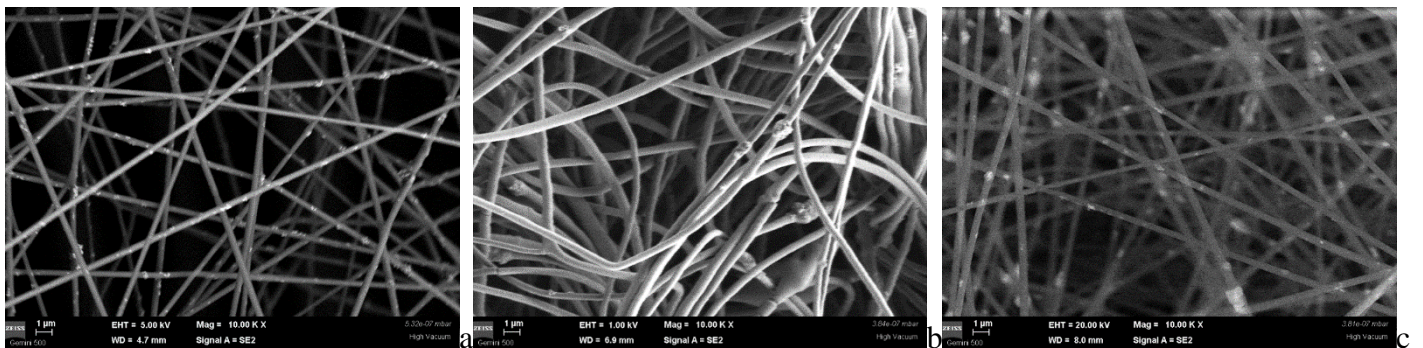


Figura 1. Imagini SEM ale nanofibrelor de PMMA dopate cu nanoparticule de ZnO (a), nanoparticule de TiO₂ (b) și amestec de nanoparticule de ZnO +TiO₂ (c).

Nanofibrele dopate cu ZnO și TiO₂ au fost imersate în soluție apoasă de MB (Figura 2a - inset) și apoi au fost iradiate folosind simulatorul solar, soluția degradată de MB fiind apoi măsurată la diferite intervale de timp (Figura 2b). Proprietățile fotocatalitice ale nanofibrelor de PMMA dopate cu ZnO au fost evaluate prin urmărirea scaderii intensității benzii de absorbție a MB cu maximumul la ~664 nm (Figura 2a). Degradarea MB crește proporțional cu creșterea timpului de iradiere atât nanofibrele dopate cu ZnO cât și nanofibrele dopate cu TiO₂. Procesul de degradare a soluției de MB în timpul iradierii cu simulatorul solar este mai eficient în cazul nanofibrelor dopate cu TiO₂.

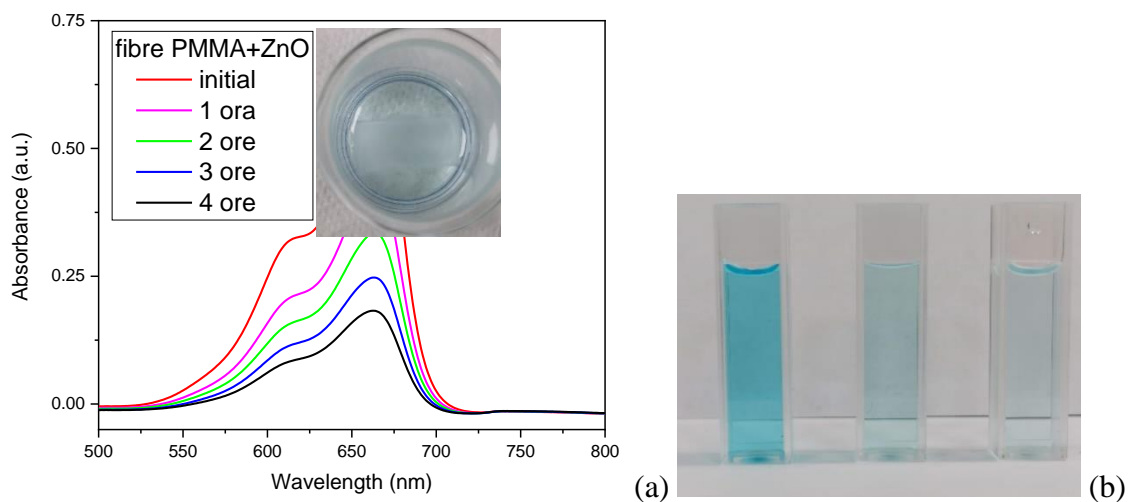


Figura 2. (a) Spectre de absorbție ce ilustrează degradarea fotocatalitică a MB în soluții apoase folosind nanofibre de PMMA dopate cu nanoparticule de ZnO (inset : Imaginea nanofibrelor electrofilate de PMMA

dopate cu ZnO, immobilizate pe suport de sticlă, imersate în soluție de MB (10^{-5} M); (b) imagini ale cuvelor ce conțin soluție de MB în timpul experimentelor de degradare fotocatalitică: inițial, după 1 oră și după 2 ore.

Concluzii și perspective:

Au fost efectuate studii privind fabricarea nanofibrelor de PMMA dopate cu nanoparticule de ZnO și TiO₂ prin procesul de electrofilare și caracterizarea proprietăților structurale, morfologice, optice și fotocatalitice ale acestor nanofibre. S-a pus în evidență prin măsurători XRD faptul că nanofibrele dopate de PMMA obținute prin electrofilare prezintă semnăturile caracteristice materialelor semiconductoare care au fost folosite pentru dopare (ZnO în faza wurzită și TiO₂ în faza anatază). Măsurătorile SEM au indicat prezența nanoparticulelor dopante de ZnO și TiO₂ în interiorul fibrelor de PMMA. Spectrele de reflectanță au arătat apariția benzilor interzise la valori specifice materialelor dopante folosite, ZnO și TiO₂. În spectrele de fotoluminescență ale nanofibrelor de PMMA dopate cu ZnO și TiO₂ au fost identificate emisii care sunt caracteristice materialelor dopante, ZnO și TiO₂. Activitatea fotocatalitică a nanofibrelor, evaluată utilizând un simulator solar și cu ajutorul spectrelor de absorbție, a indicat o eficiență ridicată a nanofibrelor de PMMA dopate atât cu nanoparticule de ZnO cât și cu nanoparticule de TiO₂.

Titlu Faza: Fenomenul de histerezis în celule solare cu perovskiti – studii experimentale și teoretice

Termen: 12/9/2019

Obiective: Studiul propus se concentrează pe înțelegerea proceselor care duc la apariția fenomenului de histerezis în celule solare cu perovskiti (PSC) și dezvoltarea unui model dinamic analitic capabil să descrie aceste efecte. Pentru aceasta vor fi fabricate și caracterizate celule solare cu perovskiti în configurația standard – de colectare a electronilor în circuitul exterior. Pe baza caracterizării

Rezultate estimate inițial:

- i) fabricarea și caracterizarea chimică și structurală a celulelor solare cu perovskiti halogenati;
- ii) caracterizare electrică și fotoelectrică a acestora, stabilirea dependenței mărimii histerezisului atât de caracteristicile intrinseci ale probelor PSC (chimia, structura, geometria și tipul interfetelor cu materialul absorbant de tip halid perovskit) cât și de condițiile de măsură (tensiuni maxime aplicate, viteze de variație a tensiunii în timpul măsurătorilor electrice, prezența sau absența iluminării);
- iii) dezvoltarea unui model dinamic analitic care să considere fenomenele care apar la nivel microscopic, atât datorită compoziției și structurii PSC cât și a condițiilor de măsură, și care să descrie cantitativ histerezisul în celulele solare cu perovskiti halogenate (PSC).

Rezultate obținute (scurta descriere a celor mai importante rezultate, cu 1-2 imagini/grafice de impact care susțin rezultatele):

Rezultatele obținute pot fi sintetizate pe 3 categorii și anume:

- (i) fabricarea și caracterizarea chimică/structurală a celulelor solare cu perovskiti halogenati;

Structura unei celule solare cu perovskiti (PSC) este sticlă/ FTO/ TiO₂ compact/TiO₂ mezoporos/ MAPI/ spiro-OMeTAD/ Au. În laborator, toate straturile componente se depun de regulă prin tehnica spin-coating, inaplicabila însă pe suprafețe mari. Una dintre principalele provocări în domeniul PSC este de a dezvolta tehnologii de fabricație ieftine, potrivite producției la scară largă. Acest lucru presupune depunerea tuturor straturilor dintr-o PSC cu tehnici aplicabile pe arii mari. Până în prezent, cu excepția stratului de TiO₂ mezoporos (TiO₂m), pentru toate celelalte au fost adaptate metode de depunere pe suprafețe mari. Am reușit să dezvoltăm o tehnică de depunere a stratului de TiO₂m pe arii mari, prin pulverizare (r-TiO₂m). Aceasta induce formarea unei structuri reticulate specifice cu cavități ovale bine delimitate, cu diametre cuprinse între 3-7 μm și ~ 350 nm înălțime (vezi Fig.1). Cu această tehnică eficiența PSC crește cu 20% (studiu efectuat pe un nr total de 42 PSC) comparativ cu situația în care stratul mezoporos era depus prin spin-coating.

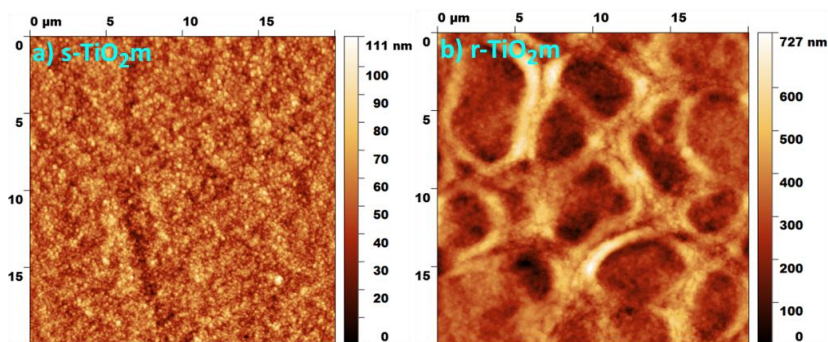


Fig.1. Imagini AFM ale straturilor TiO_2 mesoporoase depuse prin: (a) spin-coating (s- TiO_2m); (b) pulverizare (r- TiO_2m)

(ii) caracterizare electrica si fotoelectrică a PSC cu s- TiO_2m si cu r- TiO_2m

Un set de curbe J-V al celulelor PSC cu diferite tipuri de TiO_2m este prezentat în Fig.2 împreună cu histogramele pentru fiecare caracteristică a celor 42 de dispozitive. Toti parametri fotovoltaici (J_{sc} , V_{oc} , FF, PCE) îmbunătățire generală a tuturor parametrilor fotovoltaici poate fi observată în cazul probelor cu r- TiO_2m . Cea mai mare eficiență, de 14,53%, a fost obținută pentru o probă cu TiO_2 mezoporos reticulat, vezi figura 8 a.

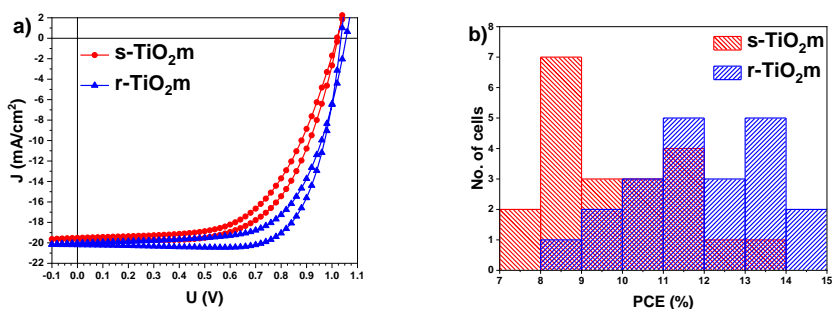


Fig.2. Comparatie între celule solare cu s- TiO_2m si r- TiO_2m : (a) caracteristici I-V; (b) PCE

Acesta este rezultatul unui J_{sc} de $20,1 \text{ mA/cm}^2$, unui V_{oc} de 1.045 V și a unui FF de 69%. In urma determinarii eficienței converisie de putere (PCE) in toate probele (vezi Fig.2b) a rezultat ca eficiența medie a dispozitivelor cu r- TiO_2m este de aproximativ 12% comparativ cu PCE mediu al celulelor cu s- TiO_2m de $\approx 10\%$, rezultând la o creștere de 22% a eficienței. Deasemenea, aceasta procedura de arie mare prin pulverizare conduce la obtinerea unor PSC cu histerezis diminuat cu 65% (index de histerezis mediu $HI=4.4$ pentru PSC cu s- TiO_2m si $HI=2.9$ pentru PSC cu r- TiO_2m).

(iii) dezvoltarea unui model dinamic analitic ce descrie cantitativ histerezisul PSC.

Am dezvoltat un model electric dinamic, care permite explicarea caracteristicilor importante ale PSC, cum ar fi forma histerezisului și apariția unei „cocoase” în masuratoarea inversă, dependentă de condițiile de masura, fără a fi necesare ipoteze suplimentare. Am obtinut expresii analitice pentru tensiunea circuitului, curentul staționar și cel instantaneu (cu funcția W Lambert). S-a obtinut astfel o descriere unificată a comportamentului histeretic al PSC pe baza unui circuit electric generic obtinandu-se o descriere realistica a caracteristicilor dinamice J – V (vezi Fig.3).

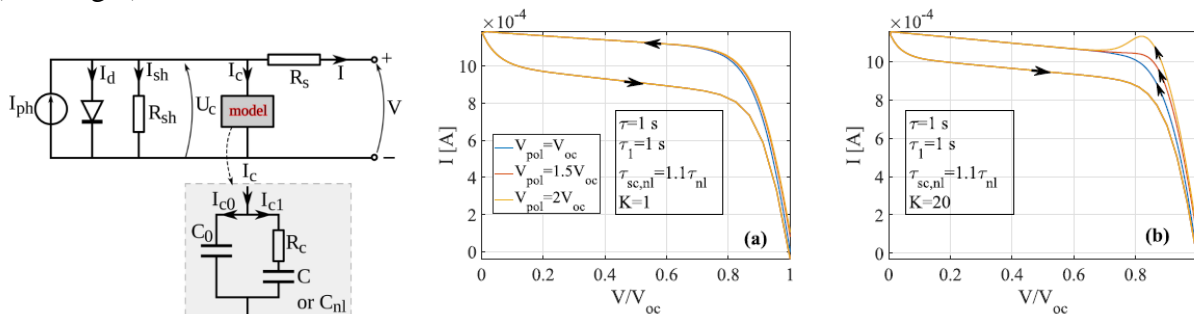


Fig.3. Circuitul echivalent al PSC considerat (stanga) si caracteristici non-staționare I-V ale unei aceeași PSC ((a) si (b)), cu diferite valori ale factorului K, un parametru ce considera dependenta de tensiune a capacitatii

C_{nl} . τ este timpul de relaxare al polarizării inițiale iar τ_{nl} al capacității C_{nl} dependente de V . $\tau_{sc,nl}$ - constanta de timp pentru descărcarea capacității C_{nl} (V) în circuitul extern.

Concluzii și perspective: Studiul efectuat s-a concentrat pe două aspecte, unul tehnologic - de a fabrica PSC eficiente, cu histerezis redus, prin metode aplicabile pe arii mari și altul teoretic - de a modela și înțelege proprietățile PSC și fenomenul de histerezis. **Principalele concluzii:**

- a fost dezvoltată o metodă nouă pentru depunerea pe arii mari a straturilor mezoporoase de TiO_2 , având la bază pulverizarea. Aceasta metodă a dus la o creștere a PCE cu 22%. Adicional, această metodă reduce efectul histeretic. Poate fi simplu integrată în instalații automate, făcând astfel producția la scară largă a PSC foarte fezabilă.

- am dezvoltat un model dinamic pentru o descriere unificată a comportamentului histeretic al PSC, explicând comportamentul neliniar al polarizării printr-o capacitate -dependentă de V . Aceasta are beneficiul asimilării termenului de polarizare direct cu condițiile experimentale, cum ar fi tensiunea de polare V_{pol} . Pe lângă caracteristicile cunoscute, obținem caracteristici care nu au fost încă analizate experimental, ca mutarea „cocoasei” din J-V reversă ca o „burtă” în cea directă, atunci când rata de recombinare este scăzută sau când tensiunea V_{pol} crește.

Perspective: creșterea eficienței PSC prin înglobarea metodelor de depunere în glow-box cu atmosfera controlată; găsirea de soluții pentru a crește și stabiliza PCE în timp ce se mărește suprafața PSC. fabricarea de module PSC eficiente prin dezvoltarea și utilizarea exclusivă a tehnologiilor aplicabile pe suprafețe mari (imprimare și sputtering);

Titlu Faza: Competiția dintre localizarea polaronica și conductivitate în oxizi de mangan

Termen: 12/9/2019

Obiective: Stabilirea legăturii dintre dopaj și taria cuplajului electron-fonon

Rezultate estimate inițial:

- stabilirea semnăturii în spectrele de fotoemisie a tranziției de la izolator la metal în CCMO în funcție de dopajul cu Ce
- obținerea experimentală a legilor de dispersie $E(k)$ pentru LSMO și CCMO în ARPES
- identificarea energiilor modurilor de vibrație active în cuplajul electron fonon din legile de dispersie obținute experimental
- modificarea polarizării orbitale și a cuplajului electron fonon în funcție de tensiunea indusă de substrat în creșterea epitaxială

Rezultate obținute (scurta descriere a celor mai importante rezultate, cu 1-2 imagini/grafice de impact care susțin rezultatele):

Doparea $CaMnO_3$ - CMO cu doar 2% Ce (2CCMO) produce tranziția de la starea de izolator cu ordonare antiferomagnetica la cea metalica, în timp ce doparea cu 4% Ce (4CCMO) crește și mai mult concentrația de purtători liberi, fiecare atom de Ce transferând câte doi electroni fiecărei celule unitate de CMO. Avantajul dopajului mic constă în izolarea exclusivă a mecanismului electronic de tranziție de la izolator la metal, fără a induce efecte suplimentare de deformare a rețelei cristaline asociate cu dopajul mai ridicat, necesar tranziției către starea metalică în cazul mult mai cunoscut al $LaMnO_3$ dopat cu Sr în proporție de 30% (LSMO).

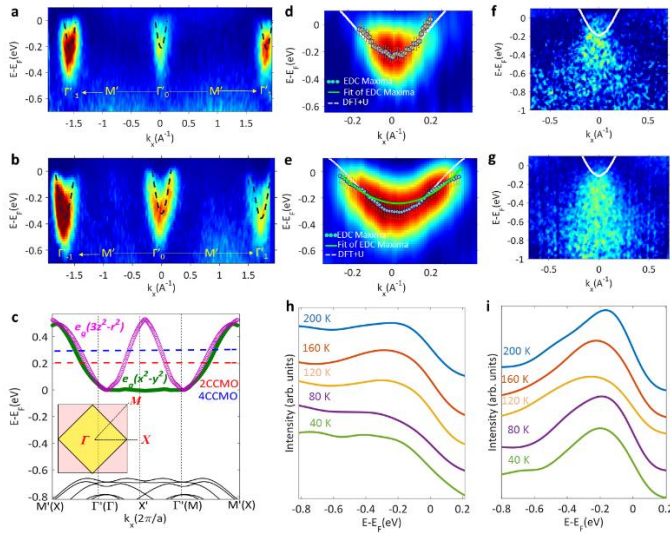


Figura 1

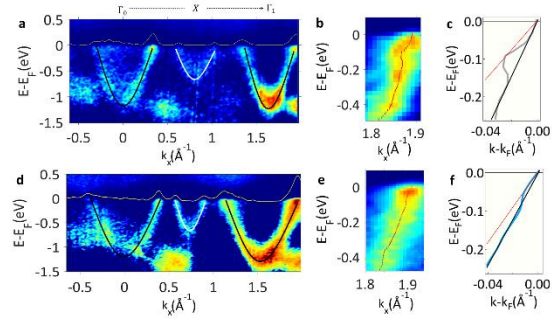


Figura 2

Figura 1: Legile de dispersie experimentale $E(k)$ pentru 2CCMO (a,d,g) si 4CCMO - 4% (b,e,f). Structura benzilor calculate folosind calcule DFT (c). Functia spectrala $A(k,\omega)$ pentru CCMO dopat cu 2% Ce (h) si 4% Ce (i) **Figura 2:** Legile de dispersie experimentale $E(k)$ la suprafata LSMO (a) si la interfata LSMO/PZT (b). Regiunea la scara marita in jurul punctului Γ la suprafata (b) si interfata (e), si renormalizarea diferita a dispersiilor $E(k)$ pentru cele doua cazuri (c,f)

Legile de dispersie electronice obtinute in experimente de fotoemisie de raze X moi cu rezolutie unghiulara pentru 2CCMO si 4CCMO sunt prezentate in Fig. 1 a-g si indica cum in mod evident dopajul cu Ce se reflecta intr-un vector de unda Fermi – k_F mai mare, care in virtutea relatiei cu concentratia de purtatori $n \sim k_F^3$, conduce la concluzia ca intr-adevar are loc o dublare a densitatii de purtatori liberi in cazul 4CCMO comparativ cu 2CCMO. Calculele de structura electronica indica mecanismul de tranzitie ca fiind umplerea graduala a benzilor din jurul punctului Γ al spatiului \mathbf{k} (Fig. 1c). Acestea sunt de fapt-un amestec de stari cu simetrie $e_g(x^2-y^2)$ si $(3z^2-r^2)$.

Un aspect remarcabil este faptul ca tranzitia la starea metalica incipienta - 2CCMO transleaza nivelul Fermi in banda de conductie, insa purtatorii liberi sunt puternic cuplati cu fononii, conducand la o crestere a masei efective a electronilor. Aceasta situatie corespunde unei mobilitati mici. Cresterea concentratiei de purtatori liberi permite ecranarea interactiei dintre electroni si fononi, la trecerea din regimul de cuplaj puternic cu fononi in cel slab/intermediar si cresterea mobilitatii, insotita de tranzitia catre ordonarea feromagnetica. Mecanismul identificat pentru tranzitia dintre regimul de cuplaj puternic spre cel slab/intermediar consta in violarea teoremei Migdal care permite neglijarea termenilor de ordin superior din dezvoltarea in serie a interactiei electron fonon atunci cand energia electronilor este mult mai mare decat cea a fononilor. In cazul CCMO, minimul benzii de conductie este comparabil cu energia fononilor din CCMO (50-70 meV), caz in care trebuiesc luati in considerare si termenii de ordin superior in taria interactiei. Acest fapt duce la aparitiei semnaturii specifice in imaginile ARPES (Fig. 1f,g) sub forma intensitatii localizate in \mathbf{k} , limitata la regiunea definita de k_F – foarte intensa in cazul 2CCMO si tot mai putin vizibila pe masura ce creste densitatea de purtatori.

Situatia identificata in cazul LSMO ($x=0.3$) (Fig 2. a,d) este radical diferita deoarece minimul benzii de conductie este mult mai mare decat energia fononilor, care, cu valori in intervalul 30-80 meV este comparabila cu cazul CCMO. Pentru LSMO, cuplajul electron-fonon este bine descris de aproximatia Migdal iar semnatura interactiei electron fonon se manifesta doar ca abatere de la dispersia parabolica a benzilor electronice in vecinatatea energiei Fermi (eng. *kink*). Energia la care apare aceasta abatere este cea a fononului implicat in cuplajul electron-fonon. Abaterea de la dispersa parabolica este cuantificata de parametrul $\lambda = v_F/v_F^*$, unde v_F si v_F^* reprezinta vitezele Fermi ale benzii electronice parabolice, respectiv renormalizata, deduse dintr-un fit linear al dispersiei benzii electronice in vecinatatea energiei Fermi. Mai departe, aceasta se propaga in modificarea masei efective a purtatorilor data de relatia $m_{eff}/m_{eff}^* = 1 + \lambda$, cu m_{eff} – masa efectiva a electronilor din banda parabolica considerata iar m_{eff}^* - masa renormalizata datorita interactiei electron - fonon.

In cazul LSMO, valoarea parametrului λ de ~ 0.9 indica o crestere a masei efective datorita interactiei cu fononii de tip Jahn-Teller din regiunea 60-70 meV, cauzati de stresul cresterii epitaxiale pe substratul SrTiO₃ cu constanta de retea mai mare decat a LSMO (Fig. 2 b.c).

O modalitate de a controla cuplajul cu fononii este, asa cum am dedus in cazul CCMO, modificarea concentratiei de purtatori. Am realizat acest fapt prin alaturarea LSMO cu un feroelectric (PZT) cu o directie a polarizarii feroelectrice orientata catre LSMO. Compensarea starii feroelectrice se realizeaza prin intermediul electronilor din LSMO, care tind sa se acumuleze spre interfata, echivaland cu un dopaj de tip n in regiunea interfetei. Intr-adevar, cresterea densitati de purtatori este semnalata de cresterea k_F (Fig. 2d), avand drept consecinta slabirea interactiei cu vibratiile retelei, si un factor de renormalizare $\lambda \sim 0.3$ (Fig. 2f). Presupunand aceleasi valori pentru timpii de imprastiere a electronilor, deducem o crestere a mobilitatii la interfata cu un factor de 2 comparativ cu suprafata libera.

Concluzii si perspective: Am evidenciat o modalitate de a controla mobilitatea in oxizii metalelor de tranzitie prin modularea concentratiei de purtatori. Modificarea concentratiei de purtatori poate fi controlata atat printr-un control explicit al dopajului, cat si prin exploatarea efectelor de la interfata cu feroelectricii. Rezultatele previzionate initial au fost obtinute iar obiectivul fazei realizat integral.

Titlu Faza: Rolul modurilor optice si vibrationale in functionarea unor sisteme hibride cu posibile aplicatii in nanofotonica si metrologie cuantica: abordare teoretica si computationala.

Termen: 12/9/2019

Obiective: Descrierea teoretica a unor efecte netriviiale in doturi cuantice plasate in nanocavitati optice sau cuplate la moduri de vibratie.

Rezultate estimate initial:

i) obtinerea structurii de stari imbracate (dressed states) pentru modelul Tavis-Cummings generalizat; ii) calculul curentilor dependenti de timp si al corelatiilor acestora in sisteme hibride; iii) implementarea numerica a ecuatiei Master nemarkoviene pentru sisteme hibride in prezenta unor semnale dependente de timp; iv) investigarea dinamicii fotonilor si/sau a modurilor de vibratie; v) analiza efectelor de interactie si a regimului de cuplaj puternic.

Rezultate obtinute:

Obiectivul principal al fazei a constat in studiul teoretic al proprietatilor de transport dependent de timp pentru un sistem hibrid descris de Hamiltonianul Tavis-Cummings binecunoscut in optica cuantica. Sistemul considerat consta din doua nanofire cuantice 1D (S_a si S_b) plasate intr-o cavitate optica si cuplate individual la rezervoare de particule cu potentiale chimice $\mu_{l,a}$ si $\mu_{l,b}$, $l = L, R$. Rezultatele experimentale recente au aratat ca in astfel de structuri hibride unul dintre subsisteme poate absorbi fotonii emisi de subsistemul vecin. Motivati de aceste constatari am investigat teoretic efectele interactiei mediate fonic asupra proceselor de transport. Am considerat ca in fiecare subsistem tunelarea electronica se poate face doar pe nivelele energetice uniparticula de energie joase $\varepsilon_{i,s}$ ($i = 1, 2$). In aceste conditii interactia mediata de fotoni este activa doar daca in fiecare subsistem se gaseste cate un electron - regim descris de Hamiltonianul Tavis-Cummings. Pentru discutarea rezultatelor este util sa introducem si numerele medii de ocupare electronice $q_{i,s}$ ale celor 2 nivele din fiecare subsistem. Cele doua subsisteme sunt identice iar frecventa modului unic al cavitatii este fixata la rezonanta, $\hbar\omega = \varepsilon_{2s} - \varepsilon_{1s}$.

Primul regim de transport considerat evidentiaza trecerea de la o dinamica de tip Jaynes-Cummings (JC) in care in sistem exista un singur electron la dinamica Tavis-Cummings (TC). Potentialul chimic $\mu_{R,a}$ este ales astfel incat ε_{2a} se afla in 'fereastra' de bias $\mu_{L,a} - \mu_{R,a}$ in timp ce $\varepsilon_{1a} < \mu_{R,a}$ (asa cum se vede in inset-ul figurii 1(a)). $\mu_{R,b}$ este fixat astfel incat amandoua nivelele uniparticula ale subsistemului S_b pot participa la transport.

Un prim calcul a vizat curentul $J_{L,a}$ care intra in subsistemul S_a in conditiile in care S_b nu este conectat la rezervoare de particule si nu contine electroni. In starea initiala, notata cu $|00, 0\rangle$, nu exista nici electroni nici fotoni in sistem. In acest caz fotonii emisi de S_a nu pot fi absorbiti de S_b iar dinamica sistemului este descrisa de

Hamiltonianul JC. Al doilea calcul porneste de la aceeasi stare initiala dar cele doua subsisteme sunt *simultan* cuplate la rezervoarele de particule astfel incat se pot popula si stările de tip Tavis-Cummings.

In Fig. 1(a) sunt prezentati curentii tranzitorii pentru cele doua configuratii mentionate mai sus (JC si TC). In absenta transportului in S_b subsistemul `deschis` S_a va evolua spre regimul de blocada coulombiana, astfel incat in stare stationara $J_{La} = 0$ si $q_{1a} \approx 1$. Acest lucru este confirmat si de evolutia ocuparii celor doua nivele q_{1a} si q_{2a} prezentata in Fig. 1(b). Oscilatiile Rabi optice sunt vizibile in regimul tranzitoriu dar dispar in stare stationara deoarece cuplajul cu firele actioneaza ca un termen de disipatie. Perioada oscilatiilor JC este $T_0 = 39$ ps si corespunde frecventei Rabi `de vid` Ω_0 . Reamintim ca in general frecventa Rabi asociata cu un numar fixat de fotoni N este data de $\Omega_N = 2g_0\sqrt{N+1}$. De notat ca in stare stationara numarul mediu de fotoni se anuleaza.

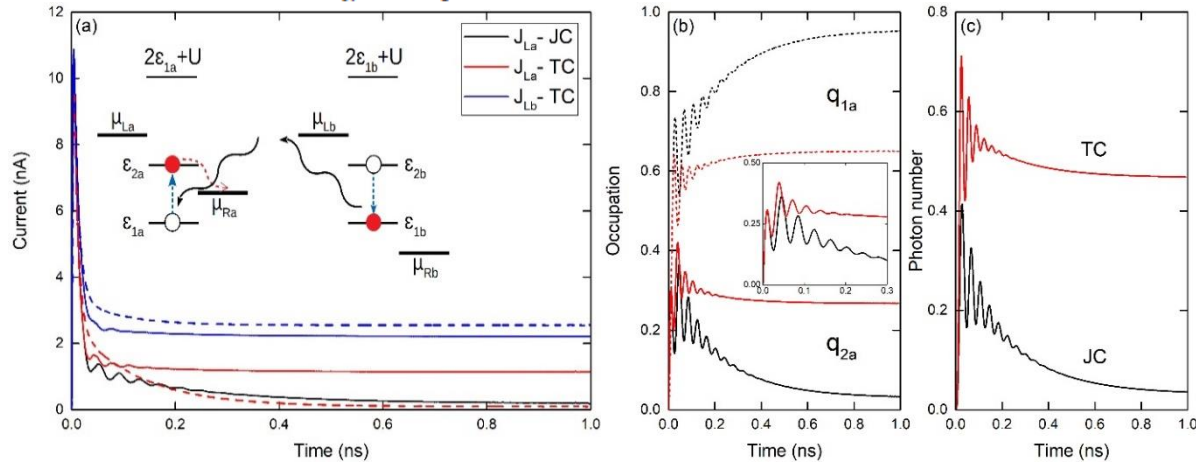


FIG. 1. a) Curentii tranzitorii in cele 2 configuratii JC si TC. Curentii obtinuti in absenta cuplajului electron-foton sunt reprezentati cu linie punctata. Inset: procesele optice si de tunelare relevante pentru dinamica TC. b) Ocuparea nivelului activ optic din S_a in regimul JC (linie punctata) si TC (linie continua). Inset: q_{2a} in regim tranzitoriu. c) Media nr. de fotoni in regimurile JC si TC. $\mu_{La} = \mu_{Lb} = 45$ meV, $\mu_{Ra} = 41.5$ meV, $\mu_{Rb} = 35$ meV, $g_0 = 53$ μ eV, $\kappa = 0$.

Regimul TC prezinta diferente notabile fata de regimul JC. Din Fig. 1(a) se observa ca in stare stationara J_{La} este finit, ceea ce implica activarea proceselor de tunelare de pe nivelul excitat ϵ_{2a} in rezervorul R_a . Aceasta `ridicare` a blocadei coulombiene in S_a se datoreaza schimbului de fotoni dintre cele 2 subsisteme. Mecanismul este sugerat in inset-ul Fig. 1(a): i) Subsistemul S_b genereaza fotoni si in starea stationara prin procese de relaxare $\epsilon_{2b} \rightarrow \epsilon_{1b}$; ii) fotonii emisi excita electronii de pe nivelul ϵ_{1a} pe nivelul excitat care contribuie la curentul stationar nenul in S_a . Acest scenariu este confirmat si de rezultatele prezentate in Fig. 1(b): in stare stationara nivelul ϵ_{1a} nu mai este complet ocupat. Se observa si faptul ca in regimul TC perioada oscilatiilor Rabi difera fata de cea din regimul JC. Intr-adevar, oscilatiile Rabi asociate stărilor `imbracate` Tavis-Cummings cu N fotoni au perioadele $\tilde{\Omega}_N = 2g_0\sqrt{4N-2}$ si $\tilde{\Omega}_N/2$.

Concluzii si perspective:

Obiectivele proiectului au fost indeplinite in totalitate. In cadrul fazei au fost publicate 3 lucrari in reviste cotate ISI, o alta lucrare fiind in curs de redactare. Rezultatele obtinute in cadrul fazei aduc elemente substantiale de noutate in raport cu formalismul teoretic de descriere a unor fenomene de interes in optica cuantica si prezic observarea experimentală a unor efecte relevante. Posibile dezvoltari ale acestei directii de studiu includ investigarea teoretica a proprietatilor de transport ale Hamiltonianului Rabi cuantic precum si considerarea efectelor cuplajului cu moduri vibrationale asociate unui nanorezonator sau unei molecule.

Titlu Faza: Morfologie controlata in materiale compozite

Termen: 12/9/2019

Obiective: Utilizarea unor nano sau/si micro obiecte (fibre scurte, nanotuburi) pentru a genera sisteme macroscopice de volum cu morfologie controlata utilizand tehnici de sinterizare asistata. Includerea acestor materiale in structuri compozite destinate unor aplicatii specifice.

Rezultate estimate initial:

Obtinerea si caracterizarea unor noi materiale compozite cu morfologie prestabilita la nivel micrometric. Evaluarea posibilitatilor de control al proprietatilor rezultate in vederea dezvoltarii de aplicatii.

Rezultate obtinute (scurta descriere a celor mai importante rezultate, cu 1-2 imagini/grafice de impact care sustin rezultatele):

Unul din punctele majore de interes in dezvoltarea materialelor avansate il constituie reducerea cantitatilor de material utilizate la un minim definit de functionalitatea lor principala. Aceasta impune indeplinirea celorlalte cerinte (in general structurale) prin imbunatatirea substantiala a proprietatilor unor componente incluse in compozite. Un exemplu tipic in acest sens este constituit de materialele metalice spongioase, avand numeroase aplicatii in domenii precum energie, al materialelor biocompatibile sau al catalizatorilor. Astfel de materiale se obtin in general prin procedee complicate, reactive sau care utilizeaza lianti sacrificabili. Sinterizarea asistata de camp electric (cunoscuta si sub numele de SPS, spark plasma sintering) constituie un procedeu rapid de a obtine diferite materiale care in mod normal sunt practic imposibil de sinterizat fara aditivi (cum sunt pulberile ceramice nanometrice) sau sunt greu sinterizabile, necesitand temperaturi inalte si timpi de procesare lungi (cum sunt materiale refractare, ceramice sau/si metalice). Desi pana in prezent fenomenul nu a putut fi demonstrat fara echivoc, in cadrul acestei metode este asumat faptul ca in urma descarcarilor care au loc datorita aplicarii pulsurilor intense de curent electric (de ordinul kA), in interiorul materialului sinterizat sunt generate „puncte fierbinti” care au rolul unor activatori de sinterizare.

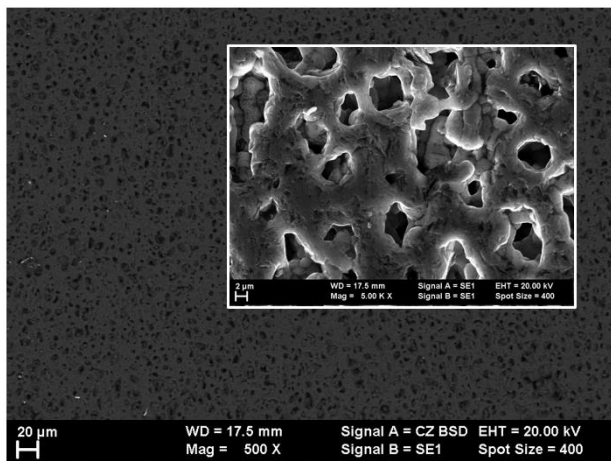


Figura 1: Structura microporoasa realizata prin SPS (imaginea principala) ilustrata prin microscopie electronica de baleiaj cu detectorul de electroni retro-imprastii). Insertia prezinta de taliul de formare al structurii (imagine realizata prin microscopie electronica de baleiaj cu detectorul de electroni secundari).

In cadrul acestei etape, bazandu-ne pe acest fenomen si utilizand compozitii adecvate de pulberi cu diferite granulatii si forme au putut fi realizate structuri poroase cu porozitati de ordinul micronilor, asa cum este ilustrat in figura de mai sus pentru o combinatie de pulberi nanometrice de carbura de siliciu si fibre scurte (whiskers) din acelasi material. Insertia din figura prezinta modul de realizare al acestei structuri poroase, prin alipirea grauntilor cu dimensiuni de 20 nm de punctele de sinterizare ale fibrelor de SiC (dimensiunea initiala cca 50 μm lungime si 500 nm diametru). Tehnologia propusa pentru fabricarea structurilor poroase a fost testata si demonstrata utilizand diferite tipuri de materiale ceramice si metalice.

Concluzii si perspective:

Abordarea propusa face apel la utilizarea tehnicilor de sinterizare in camp electric pentru structuri formate din micro-obiecte cu rol de centrii de sinterizare pentru diferite materiale si aliaje cu rol functional. Avantajele metodei propuse si demonstrate pot fi sistematizate astfel:

- natura „bottom-up” a realizarii structurii poroase permite un control facil, pur compozitional ,al morfologiei probelor;
- posibilitatea realizarii directe a structurii pe un suport sinterizat din acelasi material sau unul diferit compatibil, intr-un singur pas de sinterizare;

➤ posibilitatea acoperirii metalice a structurii poroase realizate in acelasi pas de sinterizare prin utilizarea unei cantitati adecvate de pulbere metalica avand punctul de topire inferior temperaturii de sinterizare. Realizarea unor astfel de compozite printr-o metoda rapida si scalabila la nivel industrial poate conduce la dezvoltarea unor aplicatii cu impact puternic in energie, medicina sau conservarea mediului.

Titlu Faza: Nanostructuri hibride supraconductor-feromagnet

Termen: 12/9/2019

Obiective: Fabricarea de materiale supraconductoare nanostructurate hibride de tipul supraconductor-feromagnet. Arhitecturile posibile care vor fi abordate: straturi/materiale supraconductoare cu nano-incluziuni de material feromagnetic; nanostructuri multistrat sau quasi-multistrat (strat incomplet de feromagnet); si straturi supraconductoare „decorate” cu insule nanometrice si/sau (sub)micronice de diverse forme si dimensiuni;

Rezultate estimate initial:

1. Evaluarea eficientei nanoparticulelor si/sau nanostraturilor feromagnetice ca centri pinning
2. Identificarea influentei spinilor asupra condensatului si asupra vortexurilor;

Rezultate obtinute (scurta descriere a celor mai importante rezultate, cu 1-2 imagini/grafice de impact care sustin rezultatele): Pentru atingerea obiectivelor, au fost efectuate urmatoarele activitati:

A1. Studiul proprietatilor magnetice ale heterostructurilor supraconductor/feromagnet de tipul $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ (YBCO)/ $CaRuO_3$ (CRO) depuse prin PLD. Avand la baza rezultatele obtinute in [1,2], au fost fabricate pentru prima data heterostructuri supraconductor-feromagnet de tipul YBCO/CRO depuse pe $SrTiO_3$ (STO). Prezenta picurilor (0,0,l) din difractogramele XRD arata ca straturile au crescut epitaxial, filmul de CRO prezentand feromagnetism soft (Fig. 1a) ca urmare a tensiunilor induse de stratul supraconductor de YBCO pe care a fost depus. Din cauza efectelor de proximitate electromagnetica campul magnetic patrunde in stratul supraconductor pe lungimi ce pot depasi 100 nm [3], acest efect reflectandu-se in scaderea temperaturii de tranzitie T_c a fazei supraconductoare, dupa cum se poate deduce din curba $m(H,50K)$ din inset-ul figurii Fig.1a. $CaRuO_3$ s-a dovedit a fi un material compatibil cu YBCO pentru realizarea heterostructurilor supraconductor-feromagnet de tipul YBCO/CRO si poate fi folosit pentru fabricarea valvelor de spin supraconductoare folosite pentru memorii magnetice de ultima generatie ce pot fi cuplate in mod natural cu procesoarele cuantice.

A2. Influenta nanocentrilor de pinning magnetici asupra proprietatilor supraconductoare ale materialelor ceramice nanocomposite de YBCO obtinute prin sinterizare clasica si a filmelor subtiri de YBCO obtinute prin PLD. Studiul unui supraconductor nanocompozit (SN) pe baza de dopant ce prezinta efectul Spin Peierls [4] este, in opinia noastra, singurul mod de a pune in evidenta influenta spinilor asupra vortexurilor masurand proprietatile supraconductoare (J_c , relaxarea magnetizarii) in jurul temperaturii de tranzitie Spin Peierls (T_{SP}). In acest scop au fost fabricate o serie de materiale supraconductoare nanocompozite sub forma de bulk si filme subtiri folosind YBCO si $CuGeO_3$ (CGO). Ca urmare a reactiilor chimice dintre cei doi compusi, $CuGeO_3$ s-a descompus, rezultatele obtinute nefiind cele asteptate dar au fost obtinute informatii noi care vor contribui la cunostintele fundamentale in domeniu. De exemplul, in proba bulk de YBCO+ 5%wt $CuGeO_3$ au rezultat faze feromagnetice si paramagnetice (Fig.1 (b) , figura din inset) segregate la zona dintre graunti, ce au dus la scaderea curentului critic J_c . Pe de alta parte, in filmele nanocomposite de YBCO + 2%wt $CuGeO_3$ obtinute prin ablatie laser au fost obtinute unele rezultate noi:**i**) au fost obtinuti centri de fixare cu morfologie sferica (100 nm) diferiti compozitional si distribuiti uniform fapt ce a permis cresterea epitaxiala a filmului fara ca sa se modifice T_c , in timp ce J_c a crescut de aproximativ doua ori in domeniul temperaturilor mai mici de 30 K. **ii**)A fost pus in evidenta pentru prima data efectul “*Giant Paramagnetic Meissner Effect*” in filme subtiri nanocompozite, in contradictie cu teoriile actuale care presupun aparitia acestui efect numai in probe masive. In plus, studiind relaxarea magnetizarii, a fost observata o temperatura de crossover peste care momentul magnetic creste in timp. Aceste rezultate noi vor fi disseminate intr-un articol stiintific ce va fi publicat intr-o revista cotate ISI din zona rosie.

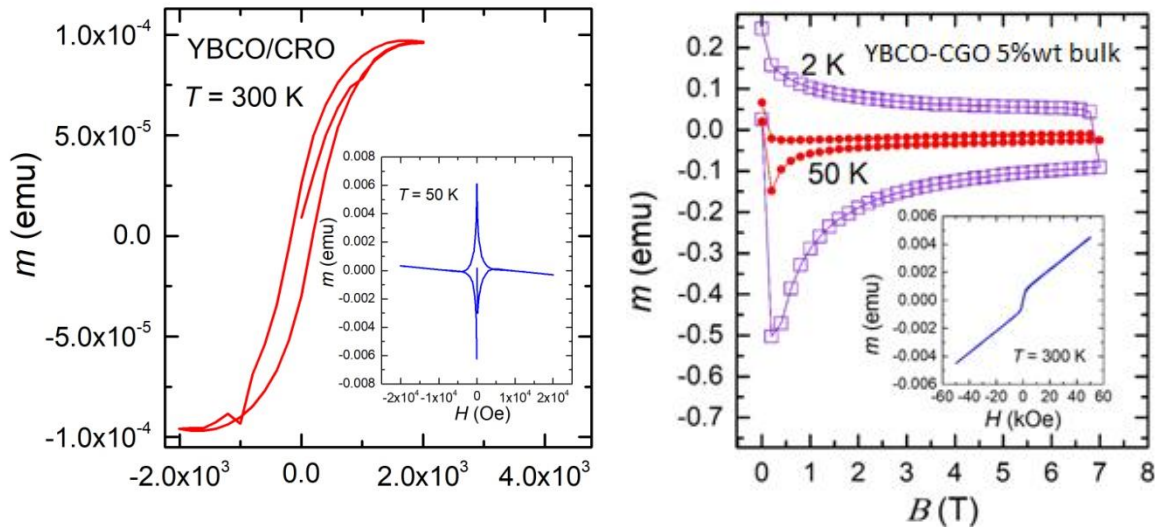


Fig.1(a) Curbe $m(H)$ la $T = 300$ K si $T = 50$ K (in inset) pentru heterostructura de tipul YBCO/CRO. **(b)** Curbe $m(B)$ la $T = 2$ K si 50 K pentru o proba bulk de YBCO dopata cu 5%wt CGO. In graficul $m(H, 300K)$ din inset se observa prezenta impuritatilor feromagnetice si paramagnetice.

Referinte: [1] Maiti, K. Phys. Rev. B 73, 235110 (2006) [2] Shivendra Tripathi, et al Scientific Reports 4 3877 (2014) [3] M. G. Flokstra et al. Phys. Lett. 115, 072602 (2019) [4] I. Ion, et al Journal of Superconductivity and Novel Magnetism 29 pp 775–780 (2016)

Concluzii si perspective:

In concluzie au fost obtinute unele rezultate noi cu impact semnificativ in cercetarea fundamentala:

- a) A fost pus in evidenta pentru prima data efectul “*Giant Paramagnetic Meissner Effect*” in filme subtiri nanocompozite de YBCO, in contradictie cu teoriile actuale.
- b) S-a observat ca centrii de fixare magnetici (fero si para) nu au o contributie benefica in probe ceramice de YBCO intrucat sunt segregati la limita dintre graunti impiedicand astfel cresterea lor.
- c) A fost folosit pentru prima data CaRuO_3 pentru fabricarea heterostructurilor supraconductor-feromagnet de tipul $\text{Y}_1\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}(300\text{nm})/\text{CaRuO}_3(50\text{nm})$. Rezultatele sunt reproductibile si pot fi folosite in diferite aplicatii bazate pe super-electronica.

Perspective: i) se va incerca inducerea de pinning prin cuplaj magnetic in filme supraconductoare de $\text{Y}_1\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ acoperite cu CaRuO_3 prin adaugarea unui strat intermediar izolator de stopare a efectelor de proximitate la interfata supraconductor-feromagnet. ii) vor fi fabricate valve de spin de tipul $\text{CaRuO}_3/\text{Y}_1\text{Ba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}/\text{CaRuO}_3$ bazate pe raspunsul magnetorezistiv al stratului supraconductor cu aplicatii in fabricarea memoriilor magnetice care pot fi cuplate usor cu procesoarele cuantice, domeniu de mare interes la ora actuala.

Titlu Faza: Studiul proprietatilor fotoelectrice ale filmelor nanocristaline pe baza de aliaje binare din sistemul SiGeSn

Termen: 12/9/2019

Obiective: Investigarea proprietatilor fotoelectrice ale filmelor nanocristaline pe baza de aliaje binare din sistemul SiGeSn si optimizarea compozitiei filmelor pentru aplicatii optoelectronice.

Rezultate estimate initial: Analiza a structurii si morfologiei filmelor obtinute prin varierea compozitiei si a conditiilor de preparare si analiza proprietatilor fotoelectrice ale filmelor astfel preparate, avand in vedere ca obtinerea unor filme cu caracteristici optime in raport cu aplicatiile vizate se bazeaza pe corelarea dintre morfologia si structura filmelor si proprietatile fotoelectrice.

Rezultate obtinute:

Aliajele din sistemul $\text{Ge}_{1-x-y}\text{Si}_x\text{Sn}_y$ contin numai elemente din grupa a IV-a si sunt studiate in special pentru posibilitatea de a extinde aplicatiile Si prin modificarea benzii interzise si prin ingineria tensiunilor interne. Cea mai importanta proprietate este obtinerea benzii interzise directe, cu aplicatii in emisia si detectia luminii in domeniul infrarosu apropiat. Aliajele binare din sistemul GeSiSn , GeSn si SiGe , au proprietati remarcabile ca materiale de volum, dar mai ales sub forma de nanocristale (NC).

In raportul de faza am analizat proprietatile fotoelectrice ale filmelor cu NC de GeSn si SiGe inglobate in oxizi, corelate cu proprietatile structurale si electrice ale acestora si cu conditiile de preparare. Probele au fost preparate prin pulverizare cu magnetron si tratament termic rapid. Depunerea s-a realizat pe substrat de Si monocristalin la temperatura camerei sau incalzit. Investigarea morfologiei si structurii filmelor s-a realizat prin difractie RX (Bruker D8 Advance, in geometrie Bragg–Brentano), microscopie electronica (Jeol ARM 200F) si spectrometrie Raman. Pentru masuratorile de spectrometrie optica in domeniul UV-VIS-IR (0,2 – 3 μm) s-au folosit spectrometrele SPECTRUM BX II si Lambda 950 (Perkin Elmer). Masuratorile fotoelectrice -au realizat folosind un lant de masura continand un criostat cu He cu circuit inchis, o sursa Keithley 236, un amplificator lock-in Stanford SR810, o lampa cu halogen de 200 W, un chopper SR540 (120 Hz) si un monocromator cu retea.

Probe de GeSn-SiO_2

Am preparat probe de $(\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x)_{1-y}(\text{SiO}_2)_y$ de tip monostrat prin co-depunere MS in vid ultrainalt din tinte de Ge, Sn si SiO_2 , pe suport de Si monocristalin si de quart. Depunerile s-au realizat fie pe substrat la temperatura camerei, fie pe substrat incalzit la temperatura T_s . S-a continuat cu tratament termic la Tann.

Am pus in evidenta ca la cresterea continutului de Sn in proba, procesul de nanocrystalizare este favorizat. Astfel, intr-o proba cu 22% Sn, depusa pe suport incalzit la temperatura $T_s=200^\circ\text{C}$ (Fig. 1), in proba asdep maximele largi corespunzatoare planurilor cristaline (111), (210) si (311) ale GeSn sunt mai pronuntate decat in proba cu 14.3 % Sn. De asemenea, nanocrystalizarea se produce la temperaturi mai mici ($T_{\text{ann}}=300^\circ\text{C}$ in proba cu 22% Sn fata de 400°C in proba cu 14.3% Sn). Remarcam segregarea $\beta\text{-Sn}$, evidentiata prin maxime la unghiuri 2θ in intervalul 30-33 grade. Observam ca odata cu segragarea $\beta\text{-Sn}$ se modifica pozitiile maximelor corespunzatoare GeSn spre unghiuri mai mari. Aceasta corespunde modificarii concentratiei de Sn in aliajul de GeSn . Din masuratorile de reflectanta si transmitanta realizate pe probe cu continut diferit de Sn am concluzionat ca prin cresterea concentratiei de Sn se obtine o scadere a gapului optic, asa cum este de asteptat. Dar, asa cum a rezultat din masuratorile de RX (Fig1), nanocrystalizarea in probe cu concentratii mari de Sn duce la segragarea $\beta\text{-Sn}$. Din datele prezentate in faza rezulta ca in probele de GeSnSiO_2 depuse prin MS procesul de nanocrystalizare a GnSn este influentat de continutul de Sn si de SiO_2 al stratului, de temperatura substratului in timpul depunerii si de temperatura de tratament termic ulterior. Probele cu continut moderat de Sn (~14 %) si de SiO_2 (~ 12 %), depuse pe substrat incalzit la 200°C si tratate ulterior la 400°C prezinta fotosensibilitate extinsa pana la 2.4 μm in SWIR, si sunt promitatoare pentru fabricarea in viitor a fotodetectorilor care sa inlocuiasca pe cei de InGaAs , folositi comercial in prezent.

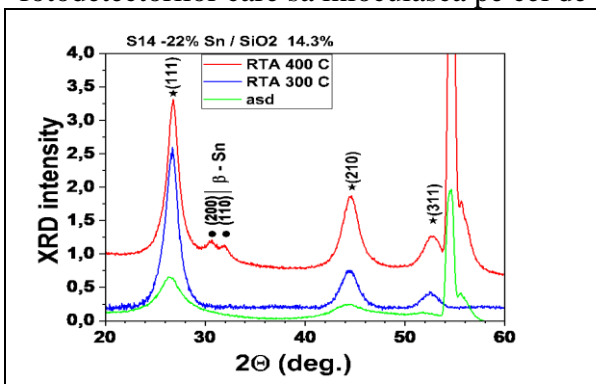


Fig. 1 Difractograma RXD pe proba cu 14.3% Sn si 11.8% SiO_2 , depusa pe p-Si, $T_s = 200^\circ\text{C}$: proba asdep, $T_{\text{ann}} = 300^\circ\text{C}$ si 400°C .

Filme nanocristaline pe baza de aliaje de SiGe

Am analizat probe de SiGe-TiO₂. Am aratat ca in urma tratamentului termic pe grosimea filmului se diferentiaza doua zone: interiorul filmului si suprafata libera a acestuia. La suprafata libera sunt prezente NC mari de SiGe, de ~ 50 nm lungime si compozitie Ge:Si = 80:20. In interiorul filmului, NC de SiGe cu structura cubica au diametrul de 5-20 nm si compozitia Ge:Si = 40:60 – Fig. 2.

Am analizat distributiile spectrale ale fotocurentului pe aceste probe in comparatie cu probe de Ge-TiO₂ preparate in conditii similare. Am determinat o deplasare a limitei de fotosensibilitate de la 1240 nm -

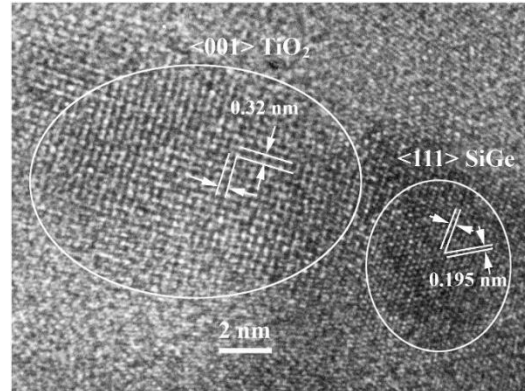


Fig. 2 Imagine HRTEM din mijlocul stratului cu NC de GeSi in TiO₂ Se observa NC de GeSi cubic de dimensiune 5-20 nm.

Ge-TiO₂ la 1310 nm la 1240 nm -SiGe-TiO₂. In mod surprinzator, limita de fotosensibilitate corespunde unor lungimi de unda mai mari in filmul cu NC de SiGe fata de cel cu NC de Ge.

Concluzii si perspective:

Am raportat rezultate ale studiilor pe sisteme de NC de GeSn si SiGe imersate in SiO₂ respectiv TiO₂. In probele de GeSnSiO₂ cu 14% Sn si 12% SiO₂ depuse pe substrat incalzit la 200 °C si tratate la 400 °C am gasit ca fotosensibilitatea se extinde pana la 2.4 μm. Materialul este astfel de interes pentru folosirea in locul InGaAs. Am studiat comparativ Ge-TiO₂ si SiGe-TiO₂. Am aratat ca nanocristalizarea se realizeaza la temperaturi mai mari in probele de SiGe-TiO₂; am obtinut o modificare a pragului de fotosensibilitate cu ~70 nm spre λ mai mari in probele cu NC de SiGe. Avantajele esentiale ale acestor materiale sunt completa compatibilitate cu tehnologia Si si faptul ca materiile prime si tehnologia de obtinere sunt prietenoase cu mediul. Continuarea acestor studii va oferi posibilitatea optimizarii proprietatilor electrooptice ale materialelor studiate, corelat cu cele structurale, functie de metodele de preparare, facand astfel posibila obtinerea de materiale sensibile in domeniul de lungimi de unda vizat pentru fiecare aplicatie. De asemenea, avem in vedere extinderea studiilor la sisteme cu NC de GeSiSn imersate in oxizi.

Titlu Faza: Investigatii privind efectul alotropilor carbonului asupra agregarii proteinelor implicate in declansarea bolii Alzheimer

Obiective: Obiectivul fazei este de a studia procesul de aglomerare (agregare) a proteinei amiloid Aβ (1-42), pe suprafata Si si a Si acoperit cu un strat de fullerena si formarea structurilor secundare/fibrilare in functie de prezenta nanomaterialului si/sau a unui compus lipidic (colesterol).

Rezultate estimate initial: **1)** depunerea de straturi de Aβ (1-42) din solutie prin metodele Langmuir-Blodgett si drop cast pe substrat de Si; **2)** depunerea de straturi de fullerena C₆₀ pe substrat de Si; **3)** depunerea de straturi de Aβ (1-42) din solutie, prin metodele Langmuir-Blodgett si drop cast, pe substrat de Si acoperit cu C₆₀; **4)** depunerea de straturi de Aβ (1-42) continand colesterol din solutie, prin metodele Langmuir-Blodgett si drop cast, pe substrat de Si si Si acoperit cu C₆₀; **5)** caracterizarea straturilor obtinute prin metode microscopice si spectroscopice pentru identificarea prezentei structurilor secundare/fibrilare; **6)** evidentierea corelatiei dintre

prezenta nanoparticulei si/sau colesterolului si dezvoltarea unui anumit tip de structura in strat; 7) evidentierea conditiilor care favorizeaza cresterea neurotoxicitatii structurilor formate prin agregare.

Rezultate obtinute: StratURI din A β (1-42) pure si dopate cu colesterol (Ch) au fost preparate prin metoda Langmuir-Blodgett (L-B) si drop cast (DC) pe substrat de siliciu monocristalin (Si) si pe substrat de Si acoperit cu un strat subtire de fullerena Buckminster (Si+C₆₀) depusa prin evaporare in vid. Au fost trasate izotermele, presiunea de suprafata functie de aria moleculara medie, pentru monostraturi Langmuir din A β (1-42), Ch si A β (1-42)+Ch depuse pe suprafata apei si a fost evaluata presiunea de colaps a fiecarui strat. Acesta a fost transferat de pe suprafata apei pe substrat in urma unor treceri successive prin interfata apa-aer, transferul fiecarui strat fiind caracterizat de o viteza de transfer (RT) corelata cu stabilitatea si calitatea stratului. Valorile pozitive/negative ale RT sunt asociate cu procese de adsorbție /desorbție a moleculelor (Fig.1). Un strat uniform si stabil de A β (1-42) a fost obtinut pe substratul de Si+C₆₀ (RT~1) (Fig.1a), iar prezenta Ch a dus la agregarea amiloidului (RT<<1)(Fig.1b).

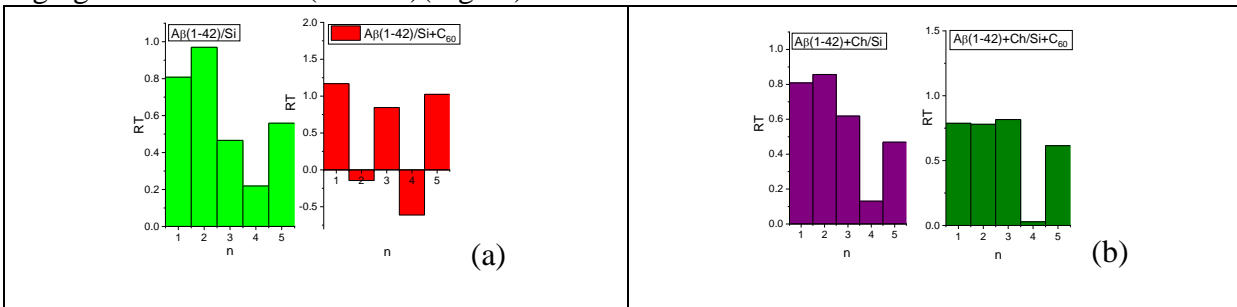


Fig.1: Rata de transfer (RT) ca o functie de numarul de cicluri de depunere (n).

Metodele SEM, AFM si FTIR au fost folosite pentru caracterizarea morfologica si spectrala a straturilor obtinute si investigarea formarii structurii secundare tip fibrila in procesul de auto-organizare a moleculelor in prezenta fullerenei si/sau colesterolului.

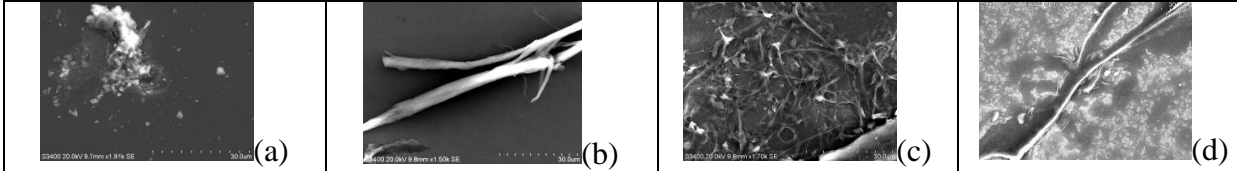


Fig.2: Imagini SEM

Imaginile SEM au evidentiat pentru stratul de A β (1-42) depus prin L-B pe Si+C₆₀ o morfologie prezentand clusteri continand forma oligomerică a amiloidului (Fig.2a), in timp ce pentru stratul de A β (1-42) cu Ch este dominanta o morfologie prezentand manunchiuri de fibrile (Fig.2b). Prezenta atat a colesterolului cat si a stratului tampon de C₆₀ a determinat o morfologie caracterizata de fibrile avand diferite grosimi si in cazul stratului depus prin DC (Fig.2c,d).

Morfologia straturilor de amiloid este afectata mai mult de metoda de depunere decat de prezenta stratului intermediar de fullerena. Straturile depuse, atat pe Si cat si pe Si+C₆₀, prin L-B sunt mai netede (Fig.3c,d) decat cele depuse prin DC (Fig.3a,b), procesul de transfer al stratului de pe suprafata apei pe substrat favorizand procesele de adsorbție/desorbtie si raspandirea moleculelor pe suprafata substratului.

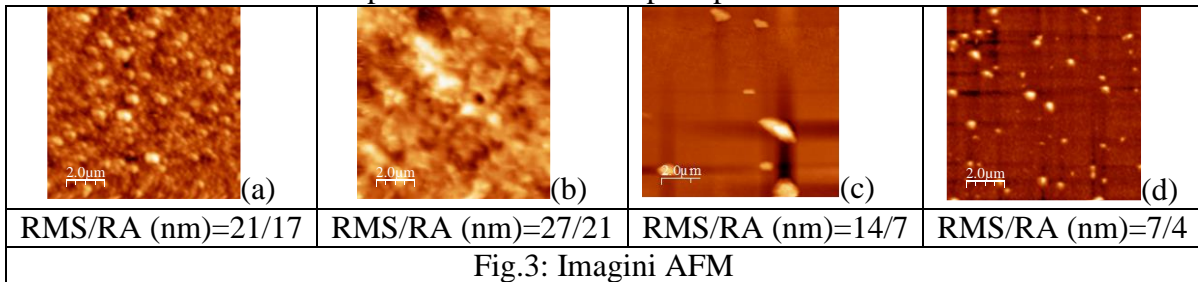


Fig.3: Imagini AFM

Prin analiza FTIR s-a putut identifica tipul de structura in corelatie cu modurile specifice de vibratie IR ale peptidelor, o anumita structura fiind caracteristica intr-un anumit interval spectral. La depunerea prin L-B a stratului de amiloid atat pe Si cat si Si+C₆₀ (Fig.4a) domina forma oligomerică care este mult mai toxica decat fibrilele mature. Adaugand colesterol, forma oligomerică continua sa domine si alaturi de tendinta la fragmentare a fibrilelor este asociata cu o neurotoxicitate crescuta (Fig.4b). Chiar si in cazul straturilor depuse prin DC, in care predomina forma fibrilara indiferent de substrat, colesterolul a dus la reducerea numarului de fibrile in detrimentul formei oligomerice corelata cu o neurotoxicitate crescuta.

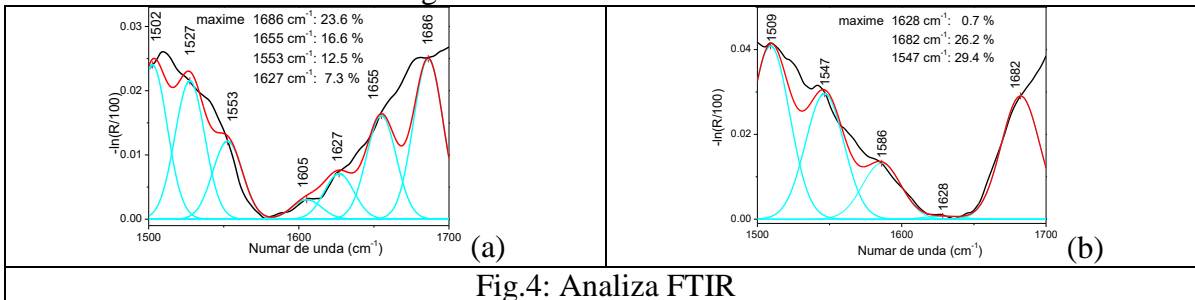


Fig.4: Analiza FTIR

Concluzii si perspective: Datorita structurii fibrilare rezistanta la procesele normale de degradare a proteinelor, A β (1-42) este asociat in mare parte cu bolile neurodegenerative cum ar fi Alzheimer, Parkinson and Creutzfeldt-Jakob. In ultima vreme, neurotoxicitatea acestei peptide a inceput sa fie corelata atat cu procesele de formare a fibrilelor cat si cu cele din fazele initiale de formare a oligomerilor considerati chiar mai neurotoxici decat fibrilele. Prin interactia cu A β (1-42), formele alotrope ale carbonului pot, in anumite conditii, determina formarea unor structuri dezordonate care pot inversa procesul de formare a fibrilelor. Rezultatele mentionate confirma faptul ca, colesterolul are un efect dominant asupra structurii A β (1-42) ducand la preponderenta formei oligomerice si distrugerea partiala a formei fibrilare, ceea ce determina cresterea neurotoxicitatii si a probabilitatii de afectare neuronală.

Obiectivul fazei a fost atins si au fost obtinute rezultatele estimate initial, mentionate mai sus.

Aceste rezultate preliminare deschid perspective pentru noi studii orientate spre: investigarea efectului altor nanomateriale (nanotuburi de carbon, grafena) asupra procesului de agregare a peptidelor si investigarea procesului de agregare a polipeptidelor pe un substrat lipidic (ca o prima aproximatie a membranei celulare).

Titlu faza: Dezvoltarea de metasuprafete și testarea acestora prin tehnici rezonante de analiză

Termen: 12/9/2019

Obiective:

1. Realizarea de metasuprafete - arii de rezonatori optici cu dimensiuni si distante relative intre ei mult mai mici decât lungimea de undă de operare;
2. Studii de caracterizare prin spectroscopie de absorbtie cu cavitate rezonantă în undă evanescentă și spectroscopie Raman amplificată de suprafață

Rezultate estimate initial: realizarea metasuprafetelor si caracterizarea parametrilor intrinseci ai acestora.

Metasuprafetele (MTS) sunt interfete cu grosimi mai mici decat lungimea de unda de lucru, cu nanostructuri functionale distribuite periodic pe interfata la distante sub lungimea de unda. Nanostructurile functionale produc deplasari de faza, iar ansamblul lor constituie un caz bidimensional de metamaterial. Componentele cu MTS imbunatatesc rezolutia spectrala in sistemele spectroscopice rezonante si rezolutia spatiala in tehnicile imagistice. Detaliile mai mici decat lungimea de unda incluse in undele evanescente sau undele de suprafata din campul apropiat al probei sunt convertite in unde de propagare prin intermediul MTS si transferate in campul indepartat, unde este plasat fotodetectorul. Aplicatiile tehnicii sunt, de exemplu, biodetectia celulara sau a anticorpilor si dozarea agentilor terapeutici in tratarea cancerului, in acord cu standardele privind dispozitivele si echipamentele medicale.

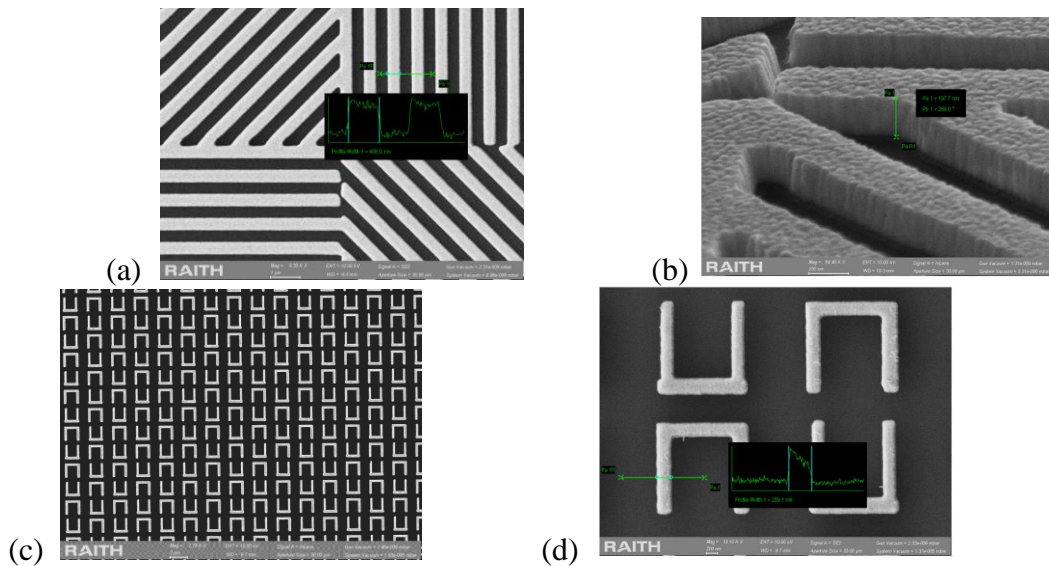


Fig.1 MTS realizate prin Electron Beam Lithography (EBL) si caracterizate prin SEM:
 (a) si (b) detaliile ariei de micropolarizori liniari (MTS1) cu Au(200 nm)/Cr(5 nm)/Si, grosimea liniei de 400 nm, (c) si (d) detaliile ariei cu proprietati de retardor in sfera de unda (MTS 2) cu grosimea liniei de 250 nm. Ariile au fost realizate pe acelasi substrat de Si: MTS1 pe o fata, MTS2 pe a doua fata pentru a forma un analizor de stari de polarizare compact, util in imagistica de IR.

Sistemul experimental pentru testarea MTS din Fig.2 cuprinde: 1-calota sferica din BK7, 2-lichid pentru adaptarea indicelui de refractie, 3-laser acordabil cu coloranti, 4 si 5-oglinzile cavitatii rezonante pentru spectroscopie de absorbtie in unda evanescenta (EW-CRDS), 6-polarizor linear cu rol de analizor, 7-divizor de fascicul, 8-modul detector cu tub fotomultiplcator, 9-monitorul pentru afisarea semnalului EW-CRDS, 10-spectrometru, 11-monitor pentru spectroscopia cu rezonante plasmonice de suprafata (SPRS), 12-unda evanescenta, 13-unda de propagare, 14-componenta optica cu MTS1 si MTS2.

Undele de propagare continand si detaliile din camp apropiat sunt directionate catre fotodetectorul plasat in camp indepartat.

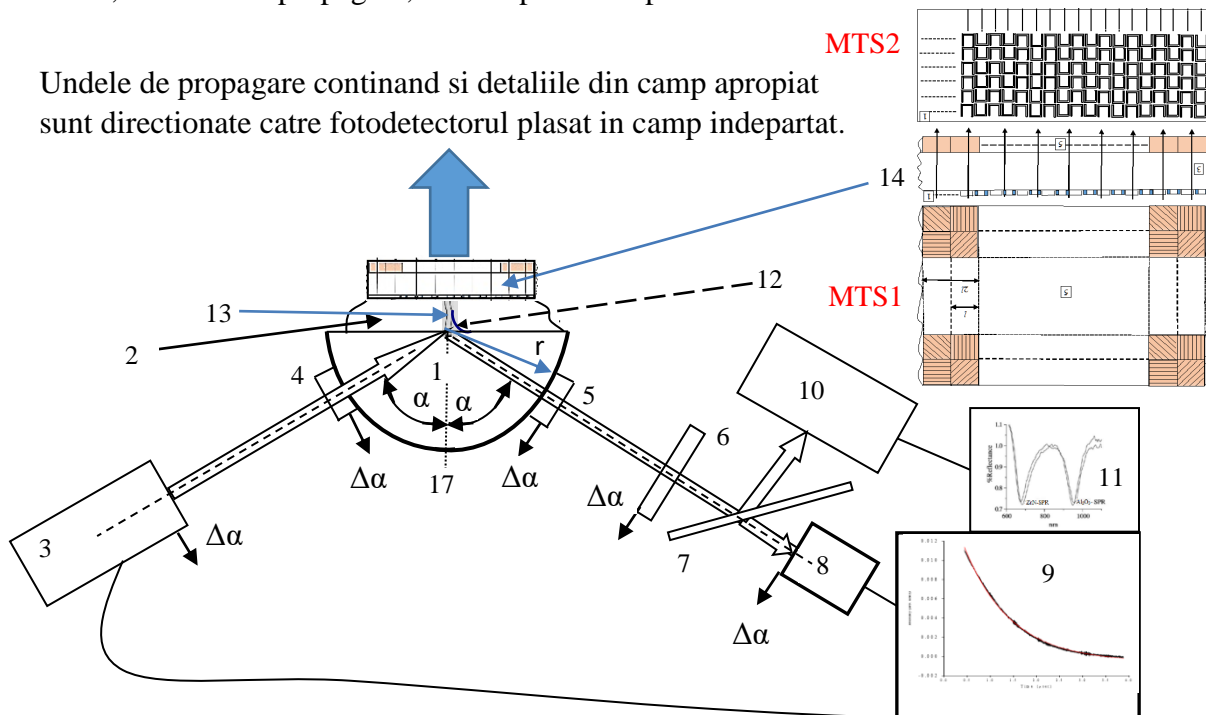


Fig.2 Sistemul experimental pentru testarea metasuprafețelor (MTS1+MTS2)

Rezultate obtinute: In Fig. 3 se observa o diferentiere clara intre MTS doar in spectrele Raman, semnalul in IR a substratului fiind atenuat mult de structura mai densa de pe suprafata MTS1.

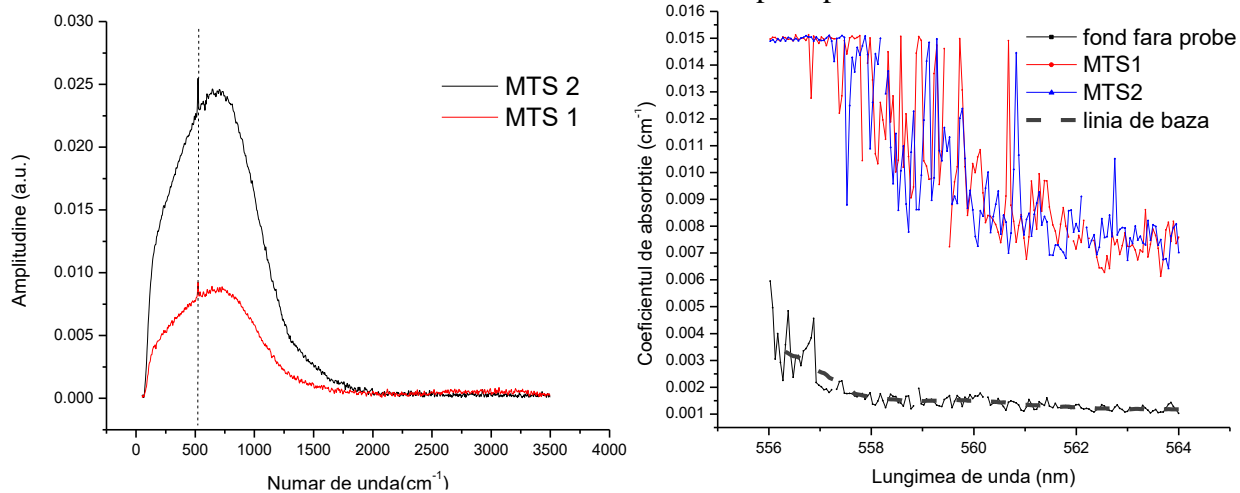


Fig.3a) Spectrele Raman cu linia Si evidentiata, b) spectrele EW-CRDS fara diferentieri majore

Concluzii si perspective: Realizarea metasuprafetelor s-a facut prin EBL pe substrat de Si si s-au caracterizat prin spectroscopie Raman si EW-CRDS. Rezolutia structurilor va fi sporita prin fabricarea MTS pe substrat de BK7 pentru imagistica in vizibil, spectroscopie cu rezonanțe plasmonice de suprafață si spectroscopie Raman amplificată de suprafață. Testarea se va face pentru dozarea [(N₂H₅)HSO₄], anticorpilor care actioneaza impotriva factorului complementar H si a factorului de activare a macrofagelor derivat din protein Gc (GcMAF) in terapia oncologica.

Titlu Faza: Studiul efectelor campurilor magnetice variabile si statice asupra reactiilor fotocatalitice pe suprafata nanoparticulelor de TiO₂

Termen: 12/9/2109

Obiective:

1. Determinarea si analiza efectelor induse de campuri magnetice variabile si statice asupra eficientei reactiei de reducere fotocatalitica a sarii de tetrazolium MTT (3-(4,5-Dimethylthiazol-2-yl)-2,5-diphenyltetrazolium-bromide) pe suprafata nanoparticulelor de TiO₂;
2. Analiza fotogenerarii de specii reactive de oxigen (anion superoxid) pe suprafata nanoparticulelor de TiO₂ dispersate in mediu apos, expuse concomitent la radiatie UV si camp magnetic alternativ;

Rezultate estimate initial:

1. Obtinerea de nanoparticule de TiO₂ cu activitate fotocatalitica diferita prin hidroliza controlata a alcoxizilor de titan si varierea conditiilor de tratament post-hidroliza;
2. Evaluarea eficientei reactiei fotocatalitice TiO₂-MTT in prezenta campurilor magnetice alternative/statice;
3. Determinarea efectului speciilor reactive de oxigen fotogenerate in mediul de reactie asupra reactiei fotocatalitice TiO₂-MTT in absenta/prezenta campurilor magnetice externe.

Rezultate obtinute:

Au fost sintetizate nanoparticule de dioxid de titan (TiO₂) prin metoda precipitarii in solutie neutra/acida/bazica pornind de la butoxid de titan (C₁₆H₃₆O₄Ti). Precipitarea a fost urmata de tratament termic.

Au fost studiate eficienta reactiei fotocatalitice TiO₂-MTT si fotogenerarea de radicali superoxid (•O₂⁻) in conditii de expunere la radiatie UV (365 nm) si camp magnetic alternativ (CMA) (Fig. 1a), prin determinari spectrofotometrice ale concentratiei produsului de reactie si, respectiv, rezonanta electronica de spin (RES). Rezultatele indica o scadere a eficientei reactiei fotocatalitice in prezenta campurilor generate de curenti cu

intensitatea sub 150 A. Pentru intensitati mai mari ale curentului s-a observat o proportionalitate directa intre intensitatea campului si eficienta reactiei TiO₂-MTT (Fig. 1b).

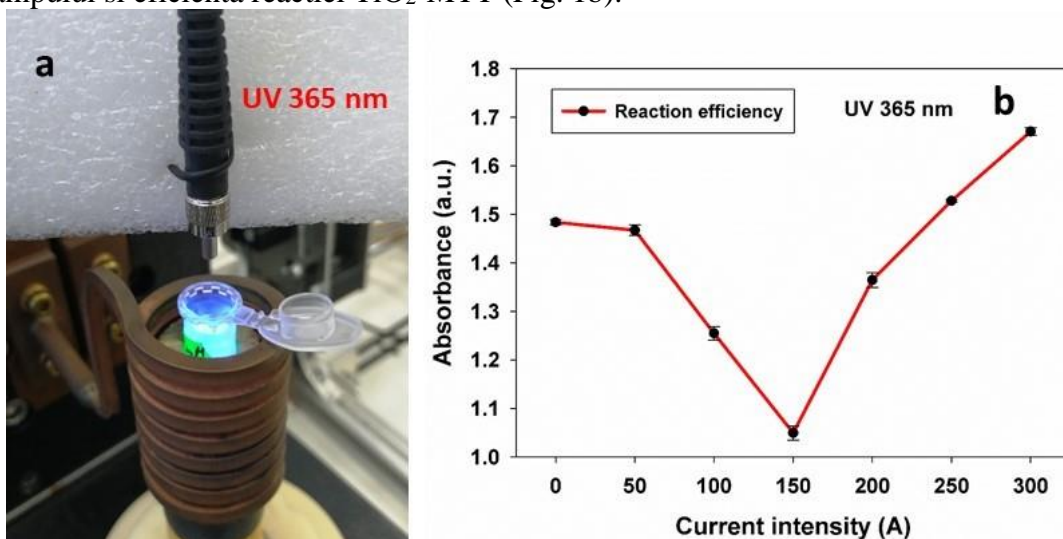


Fig. 1 a) expunerea concomitenta a mediului de reactie la radiatie UV si CMA; b) dependenta eficientei reactiei fotocatalitice de intensitatea CMA

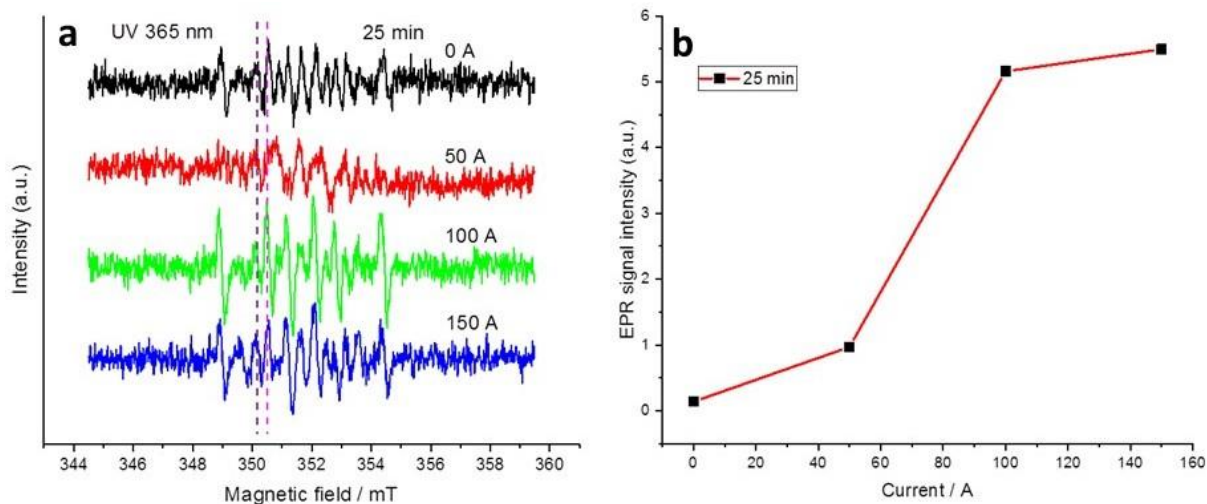


Fig. 2 a) semnalul RES pentru diferite intensitati ale curentului electric (timp de expunere 25 de minute); b) cinetica fotogenerarii de anion superoxid in functie de intensitatea CMA aplicat

Radicalii superoxid fotogenerati au fost stabilizati folosind 5,5-Dimethyl-1-pyrroline N-oxide (DMPO) si analizati prin RES (Fig. 2a). A fost evidentiata o proportionalitate inversa intre intensitatea semnalului RES (concentratia de anion superoxid din probe) si eficienta reactiei fotocatalitice pentru intensitati ale curentului in intervalul 0-150 A (Fig. 2b). Cazul 150-300 A necesita adaptarea setup-ului experimental si va fi investigat ulterior. O posibila explicatie pentru acest rezultat ar putea fi implicarea electronilor fotogenerati in doua reactii concurente: reducerea fotocatalitica a MTT [1] si, respectiv, formarea radicalilor superoxid prin reactia cu moleculele de oxigen din probe (favorizata la intensitati ale curentului in intervalul 0-150 A). Aceasta ipoteza va fi investigata in studii viitoare.

Concluzii si perspective:

Rezultatele obtinute dovedesc existenta influentei campurilor magnetice alternative asupra fotogenerarii speciilor reactive de oxigen (anion superoxid) pe suprafata nanoparticulelor de TiO₂. De asemenea, a fost evidentiata proportionalitatea inversa dintre eficienta fotogenerarii de anion superoxid si eficienta reactiei fotocatalitice de reducere a sarii de tetrazolium MTT sub iradiere UV la 365 nm si camp magnetic alternativ generat de curenti pana la 150 A in setup-ul experimental utilizat. A fost lansata o ipoteza privind mecanismul

responsabil pentru aceasta proportionalitate inversa pe baza rezultatelor obtinute in studii anterioare efectuate la INCDFM privind mecanismul reactiei TiO₂-MTT.

Studiul va fi continuat prin:

- determinari sistematice ale cineticilor de fotogenerare pentru mai multe tipuri de ROS
- determinarea efectelor lungimii de unda a radiatiei UV si frecventei campului magnetic alternativ asupra proceselor studiate
- corelarea rezultatelor privind eficienta fotogenerarii de ROS sau desfasurarii reactiilor fotocatalitice cu determinari UV-Vis privind largimea benzii interzise a semiconductorilor implicati in studiu si cu alte tipuri de caracterizari morfo-structurale si fotoelectrochimice

[1] Traian Popescu, Andreea R. Lupu, Valentin Raditoiu, Violeta Purcar, Valentin S. Teodorescu, On the photocatalytic reduction of MTT tetrazolium salt on the surface of TiO₂ nanoparticles: Formazan production kinetics and mechanism, Journal of Colloid and Interface Science 457 (2015) 108–120

Titlu Faza: Realizarea unui pachet software performant si multifunctional pentru analiza datelor multidimensionale rezultate din spectro-microscopie I: realizarea si testarea pachetului software și II: elaborarea si diseminarea manualului de utilizare.

Termen: 9/9/2019 si 11/14/2019

Obiective:

Dezvoltarea un pachet de programe sub platforma Igor Pro pentru extragerea rapidă de informații din date multidimensionale (cuburi și hipercuburi de date), precum și pentru analiza automată prin simulări (sau “deconvoluții”) ale spectrelor individuale. Realizarea unui manual de utilizare pentru pachetul software dezvoltat în faza anterioară. Diseminarea manualului de utilizare și a pachetului software în comunitatea științifică a spectro-microscopiei de fotoelectroni.

Rezultate estimate initial:

Principalul rezultat estimat este un pachet integrat software și documentația aferentă pentru analiza datelor de spectromicroscopie, care se obțin în momentul de față la facilitățile moderne de radiație de sincrotron. Pachetul va funcționa sub platforma Igor Pro, folosită pe larg în comunitatea științei materialelor și a suprafețelor folosind tehnici spectroscopice și spectromicroscopice.

Rezultate obtinute:

Spectro-microscopia de fotoelectroni este o tehnică experimentală presupunând înregistrarea câte unui spectru de fotoelectroni în puncte distincte de pe suprafața probei. Rezoluția tehnicii depinde de analizorul de electroni folosit, dar în mod special și de rezoluția spațială a sursei de raze X. Este binecunoscută dificultatea de a se propune “optici de raze X” care să ofere o focalizare nanoscopică a acestora. Monocromatoarele curbate care sunt adaptate pe surse convenționale de raze X pot conduce la o rezoluție spațială de 2 – 20 μm. În INCDFM există o astfel de instalație produsă de Kratos, care a și fost exploatată în modul spectromicroscopic recent [1]. Pentru rezoluții spațiale mai bune, se utilizează radiația de sincrotron împreună cu optici de focalizare de tipul “Fresnel zone plates”. În ultima vreme, grupul de Știința Suprafețelor și Interfețelor din INCD Fizica Materialelor a obținut timp de fascicul pe linii care dispun de asemenea facilități, cum ar fi linia SpectroMicroscopy de la sincrotronul Elettra din Trieste, Italia [2–4] sau linia Antares (Analysis Nano-spot Angle Resolved photo Emission Spectroscopy) de la sincrotronul Soleil de la Saclay, Franța [5]. Prima linie are rezoluția spațială estimată de 0,6 μm, iar a doua de cca. 100 nm. În cadrul acestei faze s-au obținut următoarele rezultate:

- a) Realizarea de module pentru analiza rapidă și vizualizarea imediată a spectrelor.
- b) Realizarea de module pentru vizualizarea imediată a intensităților integrate pe regiuni de interes.
- c) Realizarea de module de generare de filme din date înregistrate la momente de timp diferite sau în regiuni energetice diferite.
- d) Realizarea de module pentru fitarea automată a datelor experimentale și reprezentarea dependențelor parametrilor de fitare.

De asemenea, s-a testat în mod exhaustiv fitarea automată a datelor de spectromicroscopie și pe seturi de date obținute la Antares. S-a optimizat programul de fitare automată, scăzându-se durata unei fitări de la 7 secunde la 2,5 secunde, ceea ce înseamnă că un set de date cu 10 000 spectre poate fi realizat în cca. 7 ore. În Figura 1 prezentăm primul astfel de rezultat obținut.

Bibilografie:

- [1] C. Beșleagă, L. Abramiuc, V. Stancu, A.G. Tomulescu, M. Sima, L. Trincă, N. Plugaru, L. Pintilie, G.A. Nemneș, M. Iliescu, H.G. Svavarsson, A. Manolescu, I. Pintilie, *J. Phys. Chem. Lett.* **7**, 5168–5175 (2016).
 [2] D.G. Popescu, M.A. Hușanu, L. Trupină, L. Hrib, L. Pintilie, A. Barinov, S. Lizzit, P. Lacovig, C.M. Teodorescu, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17**, 509–520 (2015).
 [3] M.A. Hușanu, D.G. Popescu, C.A. Tache, N.G. Apostol, A. Barinov, S. Lizzit, P. Lacovig, C.M. Teodorescu, *Appl. Surf. Sci.* **352**, 73–81 (2015).
 [4] L.E. Abramiuc, L.C. Tănase, A. Barinov, N.G. Apostol, C. Chirilă, L. Trupină, L. Pintilie, C.M. Teodorescu, *Nanoscale* **9**, 11055–11067 (2017).
 [5] A. Pancotti, J. Wang, P. Chen, L. Tortech, C.M. Teodorescu, E. Frantzeskakis, N. Barrett, *Phys. Rev. B* **87**, 184116(1–10) (2013).

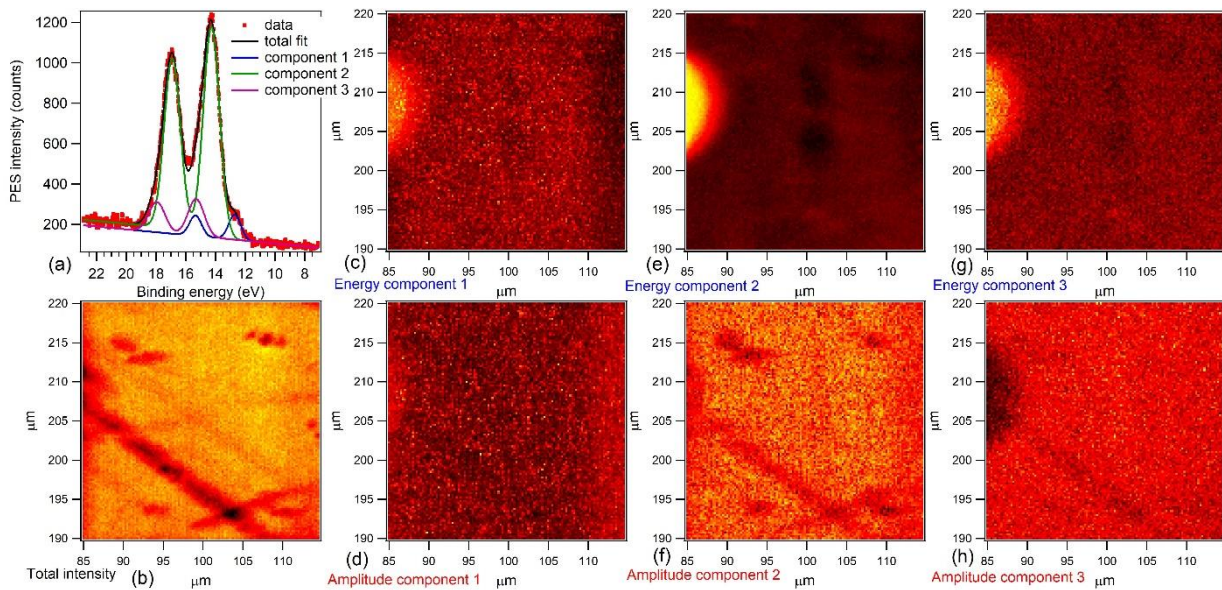


Figura 1. Analiză prin fit automat a datelor spectro-microscopice obținute la Antares. (a) reprezintă un exemplu de spectru obținut pentru un punct, împreună cu fitul cu 3 dubleți; (b) reprezintă harta intensităților totale, generată de programul de achiziție Antares; (c, e, g) hărți ale energiilor de legătură pentru cele 3 componente din fit; (d, f, h) hărți ale amplitudinilor integrale pentru cele 3 componente. Proba analizată a fost un strat subțire de 200 nm $\text{Pb}(\text{Zr},\text{Ti})\text{O}_3(001)$ după procedura standard de curățare prin încălzire în atmosferă de oxigen (5 mPa, 4 ore).

Concluzii și perspective:

Faptul ca punem la dispozitia comunității de spectro-microscopie aceste soft-uri ne va spori vizibilitatea (inclusiv acumulare de citări) pe termen lung și mediu; aceasta acțiune va demonstra ca suntem un grup implicat în comunitate și ne va oferi un fel de statut de "user" privilegiat, ne așteptăm așadar ca pe viitor să obținem mult mai ușor timp de fascicul pe aceste linii. O ora de fascicul la Antares (de exemplu) este evaluată la cca. 1000 Euro, iar în cursul unei sesiuni obținem 5-7 zile de fascicul, deci între 120 000 și 168 000 Euro. În concluzie, avantajele estimate ale dezvoltării acestui software, scrierii manualului și popularizării pentru institut se pot cifra la 1–2 milioane de lei anual.

Titlu Faza: : Testarea unitarității matricii CKM si estimarea elementului V_{ud} prin folosirea unui cod numeric performant de calcul a factorilor spațiu de fază

Această fază a fost împărțită în două etape:

a) Pregătiri preliminare ale codului numeric de calcul al factorilor spațiu de fază pentru tranzițiile beta super-permise.

b) Estimarea elementului V_{ud} din matricea CKM si testarea unitarității acesteia

Termen: 12/9/2019

Obiective

Obiectiv general: Testarea unitarității matricii Cabibbo–Kobayashi–Maskawa

Obiective specifice:

-dezvoltarea si testarea unor coduri numerice performante pentru calcul factorilor spațiu de fază pentru tranziții beta super-permise

-calculul valorii elementului V_{ud} din matricea Cabibbo–Kobayashi–Maskawa (CKM) prin utilizarea valorilor factorilor spațiu de fază si a celor mai noi valori experimentale ale mărimilor de interes pentru tranzițiile super-permise.

Rezultate estimate:

-obținerea unor rezultate precise pentru factorii spațiu de faza pentru tranzițiile super-permise

-obținerea valorii elementului de matrice V_{ud} cu o precizie mare astfel încât sa fie testată unitaritatea matricii CKM

Rezultate obținute:

Măsurătorile precise ale timpilor de înjumătățire ale dezintegrării β nucleare între stări analoage de spin, $J^\pi = 0^+$, și izospin, $T = 1$, sunt teste fundamentale pentru proprietățile interacțiunii slabe. Toate aceste tranziții sunt cele ce pot proba conservarea curenților vectori slabi și pot pune constrângeri asupra curenților scalari în interacțiunea slabă. De asemenea, acestea oferă cea mai precisă valoare a lui V_{ud} , unul dintre elementele din matricea Cabibbo-Kobayashi-Maskawa (CKM) de mixaj a cuarcilor. Prin determinarea elementului V_{ud} cu incertitudine cât mai mică, se poate spune că tranzițiile β de acest tip sunt cele mai bune teste pentru demonstrarea unitarității matricii CKM, proprietate fundamentală a Modelului Standard electro-slab [1]

Pentru atingerea standardelor de precizie in experimentale actuale pentru mărimile măsurate în tranzițiile beta super-permise, metoda de calcul ale factorilor spațiu de fază ce intra in formula ratelor de tranziție trebuie îmbunătățite.

Pentru o tranziție β permisă factorul spațiu de fază ce înglobează cinematica dezintegrării se definește astfel

$$f = \int_1^{W_0} pW(W_0 - W)^2 F(Z, W) dW \quad (1)$$

unde p este impulsul particulei β , $W = \sqrt{p^2 + 1}$ este energia totală a particulei β , iar W_0 este energia maximă a particulei β . $W_0 = Q - 1(Q + 1)$ în dezintegrarea $\beta^+(\beta^-)$. Q este diferența de masă între starea inițială și finală a atomilor neutri. Ecuația 1. este scrisă in unitați naturale ($\hbar = m = c = 1$), deci uitățile de impuls sunt mc , cele de energie sunt mc^2 , iar cele de timp sunt \hbar/mc^2 . În integrand este, de asemenea, și așa numită funcție Fermi, $F(Z, W)$, care ține cont de distorsiunea funcțiilor de undă ale electronului (pozitronului) datorată densității nucleare de sarcină. Funcțiile Fermi se calculeaza cu ajutorul solutiilor radiale ale ecuației Dirac.

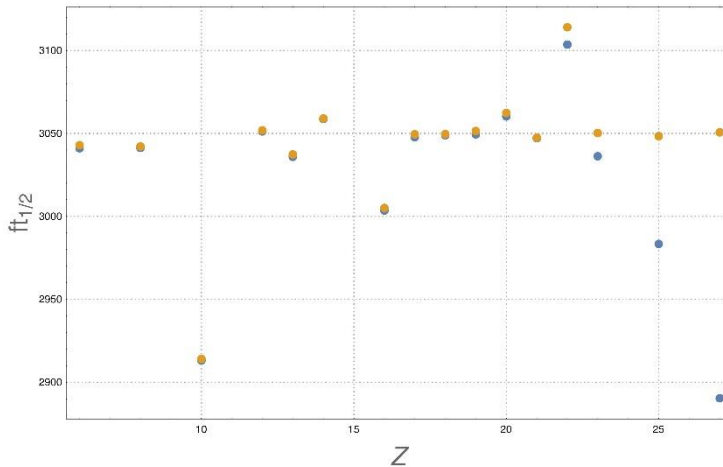


Fig. 1. Comparație între valorile $ft_{1/2}$ din [1] (portocaliu) și cele calculate cu metoda noastră ce încorporează corecțiile în funcțiile de undă (albastru) pentru 16 nuclee de interes. Valorile sunt prezentate pentru același timp experimental de înjumătățire.

Metoda de rezolvare a acestei ecuații trebuie să includă corecțiile de dimensiune finită a nucleului, de suprafață nucleară difuză, de ecranare (screening) datorată norului electronic atomic și corecții de schimb între electronul (pozitronul) emis și norul electronic atomic. Pentru îndeplinirea primului obiectiv, a fost scris un cod numeric de rezolvare a ecuației Dirac cu introducerea tuturor acestor corecții, astfel încât funcțiile de undă relativiste ale electronului (pozitronului). Apoi, au fost calculați timpuri de viață pentru tranzițiile beta permise pentru 16 nuclee de interes în astrofizică. În Fig.1 sunt prezentate rezultatele obținute în comparație cu cele prezentate în [1].

Pentru îndeplinirea celui de-al doilea obiectiv s-a făcut o medie statistică pe fiecare timp de înjumătățire al tranzițiilor super-permise măsurate experimental. Astfel că s-a putut obține o medie statistică a produsului $ft_{1/2}$ pentru toate nucleele considerate. S-au considerat aceleași corecții radiative și aceeași definiție a elementului de matrice

$$V_{ud}^2 = \frac{K}{2G_F^2(1 + \Delta_R^V)\mathcal{F}t}$$

ca în [1]. Având în vedere că diferențele între seturile de factori de spațiu de fază, am obținut o valoare cu sub un procent mai mare decât cea raportată în [2], $|V_{ud}| = 0.97425 \pm 0.00022$. Rezultatul obținut este $|V_{ud}| = 0.97836 \pm 0.00451$, cu mențiunea că incertitudinea este mai mare datorită metodei de calculare a factorului spațiu de fază.

Concluzii și perspective:

Obiectivele fazei au fost îndeplinite.

[1] J. C. Hardy and I. S. Towner, *Phys. Rev. C* **79**, 055502, (2009).

[3] St. Ghinescu, O. Nîtescu and S. Stoica, AIP Conference proceedings 2165, 020025, (2019); <https://doi.org/10.1063/1.5130986>.

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

Tip	Nr. realizat în anul 2019
Documentații	1
Studii	28
Lucrări	197

Planuri	1
Scheme	1
Altele asemenea (<i>se vor specifica</i>)	-

Din care:

4.2.1. Lucrări științifice publicate în jurnale cu factor de impact relativ ne-nul (2019):

Nr.	Titlul articolului	Numele Jurnalului, Volumul, pagina nr.	Nume Autor	Anul publicării	Scorul relativ de influență al articolului	Numărul de citări ISI
1.						
2.						

#	Titlul	Jurnal	Autori	FI	AIS	DOI	Q
1.	HRTEM analysis of the high-temperature phases of the newly developed high-temperature Ni-base superalloy VDM 780 Premium	<i>JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS</i> , 814 , UN SP 152157 (2020)	Ghica, C; Solis, C; Munke, J; Stark, A; Gehrman, B; Bergner, M; Rosler, J; Gilles, R	3.779	0.574	10.1016/j.jallcom.2019.152157	Q1
2.	Structure and low field magnetic properties in phosphate-tellurite glasses	<i>JOURNAL OF NON-CRYSTALLINE SOLIDS</i> , 524 , UNSP 119651 (2019)	Polosan, S	2.488	0.427	10.1016/j.jncryso.2019.119651	Q1
3.	Synthesis and characterization of biocompatible polymer-ceramic film structures as favorable interface in guided bone regeneration	<i>APPLIED SURFACE SCIENCE</i> , 494 , pp.335-352 (2019)	Dascalu, CA; Maidaniuc, A; Pandele, AM; Voicu, SI; Machedon-Pisu, T; Stan, GE; Cimpean, A; Mitran, V; Antoniac, IV; Miculescu, F	4.439	0.627	10.1016/j.apusc.2019.07.098	Q1
4.	Fluorescent coumarin-modified mesoporous SBA-15 nanocomposite: Physico-chemical characterization and interaction with prokaryotic and eukaryotic cells	<i>MICROPOROUS AND MESOPOROUS MATERIALS</i> , 288 , UNSP 109583 (2019)	Tudose, M; Culita, DC; Voicescu, M; Musuc, AM; Kuncser, AC; Bleotu, C; Popa, M; Marutescu, L; Chifiriuc, MC; Nicolescu, M; Deleanu, C	3.649	0.671	10.1016/j.micromeso.2019.109583	Q1
5.	Orthorhombic HfO ₂ with embedded Ge nanoparticles in nonvolatile memories used for the detection of ionizing radiation	<i>NANOTECHNOLOGY</i> , 30 , 445501 (2019)	Palade, C; Slav, A; Lepadatu, AM; Stavarache, I; Dascalescu, I; Maraloiu, AV; Negrila, C; Logofatu, C; Stoica, T; Teodorescu, VS; Ciurea, ML;	3.404	0.791	10.1088/1361-6528/ab352b	Q1

			Lazanu, S				
6.	Low value for the static background dielectric constant in epitaxial PZT thin films	<i>SCIENTIFIC REPORTS</i> , 9 ,14698 (2019)	Boni, GA; Chirila, CF; Hrib, L; Negrea, R; Filip, LD; Pintilie, I; Pintilie, L	4.122	1.356	10.1038/s41598-019-51312-8	Q1
7.	Optical properties of folic acid in phosphate buffer solutions: the influence of pH and UV irradiation on the UV-VIS absorption spectra and photoluminescence	<i>SCIENTIFIC REPORTS</i> , 9 ,14278 (2019)	Baibarac, M; Smaranda, I; Nila, A; Serbschi, C	4.122	1.356	10.1038/s41598-019-50721-z	Q1
8.	Thermal, structural, magnetic and magneto-optical properties of dysprosium-doped phosphate glass	<i>JOURNAL OF NON-CRYSTALLINE SOLIDS</i> , 521 ,UNSP 119545 (2019)	Elisa, M; Stefan, R; Vasiliu, IC; Rusu, MI; Sava, BA; Boroica, L; Sofronie, M; Kuncser, V; Galca, AC; Beldiceanu, A; Volceanov, A; Eftimie, M	2.488	0.427	10.1016/j.jncrystol.2019.119545	Q1
9.	Internal and external surface features of newly developed porous ceramics with random interconnected 3D channels by a fibrous sacrificial porogen method	<i>APPLIED SURFACE SCIENCE</i> , 489 , pp.226-238 (2019)	Mocanu, AC; Miculescu, M; Machedon-Pisu, T; Maidaniuc, A; Ciocoiu, RC; Ionita, M; Pasuk, J; Stan, GE; Miculescu, F	4.439	0.627	10.1016/j.apusc.2019.05.354	Q1
10.	Cu _x CeMgAlO mixed oxide catalysts derived from multicationic LDH precursors for methane total oxidation	<i>APPLIED CATALYSIS A-GENERAL</i> , 586 ,117215 (2019)	Al-Aani, HMS; Iro, E; Chirra, P; Fechete, I; Badea, M; Negrila, C; Popescu, I; Olea, M; Marcu, IC	4.521	0.777	10.1016/j.apcata.2019.117215	Q1
11.	Graphitic carbon nitride based photoanodes prepared by spray coating method	<i>INTERNATIONAL JOURNAL OF HYDROGEN ENERGY</i> , 44 , pp.24430-24440 (2019)	Sima, M; Vasile, E; Sima, A; Preda, N; Logofatu, C	4.229	0.570	10.1016/j.ijhydene.2019.07.243	Q1
12.	Fabrication and characterization of Si _{1-x} Gex nanocrystals in as-grown and annealed structures: a comparative study	<i>BEILSTEIN JOURNAL OF NANOTECHNOLOGY</i> , 10 , pp.1873-1882 (2019)	Sultan, MT; Maraloiu, AV; Stavarache, I; Gudmundsson, JT; Manolescu, A; Teodorescu, VS; Ciurea, ML; Svavarsson, HG	2.968	0.745	10.3762/bjnano.10.182	Q1
13.	Synthesis and thermal, emission and dielectric properties of liquid crystalline Eu(III), Sm(III) and Tb(III) complexes based on mesogenic 4-pyridone ligands	<i>JOURNAL OF MOLECULAR LIQUIDS</i> , 290 ,UNSP 111184 (2019)	Chiriac, LF; Ganea, PC; Maximean, DM; Pasuk, I; Circu, V	4.513	0.570	10.1016/j.molliq.2019.111184	Q1

	functionalized with cyanobiphenyl groups						
14.	Manipulating the Optical Properties of Carbon Dots by Fine-Tuning their Structural Features	<i>CHEMSUSCHEM</i> , 12 , pp.4480-4486 (2019)	Luo, H; Papaioannou, N; Salvadori, E; Roessler, MM; Ploenes, G; van Eck, ERH; Tanase, LC; Feng, JY; Sun, YW; Yang, Y; Danaie, M; Jorge, AB; Sapelkin, A; Durrant, J; Dimitrov, SD; Titirici, MM	7.411	1.671	10.1002/cssc.201901795	Q1
15.	Efficacy of annealing and fabrication parameters on photo-response of SiGe in TiO2 matrix	<i>NANOTECHNOLOGY</i> , 30 ,365604 (2019)	Sultan, MT; Gudmundsson, JT; Manolescu, A; Teodorescu, VS; Ciurea, ML; Svavarsson, HG	3.404	0.791	10.1088/1361-6528/ab260e	Q1
16.	Development of W-monoblock divertor components with embedded thermal barrier interfaces	<i>FUSION ENGINEERING AND DESIGN</i> , 146 , pp.1351-1354 (2019)	Galatanu, M; Cioca, M; Ighigeanu, A; Ruiu, G; Enculescu, M; Popescu, B; Galatanu, A	1.437	0.281	10.1016/j.fusengdes.2019.02.074	Q1
17.	Sintering and irradiation of copper-based high entropy alloys for nuclear fusion	<i>FUSION ENGINEERING AND DESIGN</i> , 146 , pp.1824-1828 (2019)	Dias, M; Antao, F; Catarino, N; Galatanu, A; Galatanu, M; Ferreira, P; Correia, JB; da Silva, RC; Goncalves, AP; Alves, E	1.437	0.281	10.1016/j.fusengdes.2019.03.044	Q1
18.	Thermophysical and mechanical properties of W-Cu laminates produced by FAST joining	<i>FUSION ENGINEERING AND DESIGN</i> , 146 , pp.2371-2374 (2019)	Galatanu, A; Galatanu, M; Enculescu, M; Reiser, J; Sickinger, S	1.437	0.281	10.1016/j.fusengdes.2019.03.193	Q1
19.	Photoluminescent Hydroxylapatite: Eu3+ Doping Effect on Biological Behaviour	<i>NANOMATERIALS</i> , 9 ,1187 (2019)	Andronesco, E; Predoi, D; Neacsu, IA; Paduraru, AV; Musuc, AM; Trusca, R; Oprea, O; Tanasa, E; Vasile, OR; Nicoara, AI; Surdu, AV; Iordache, F; Birca, AC; Iconaru, SL; Vasile, BS	3.504	0.696	10.3390/nano9091187	Q1
20.	Synthesis, Characterization, and Antimicrobial Activity of Magnesium-Doped Hydroxyapatite	<i>NANOMATERIALS</i> , 9 ,1295 (2019)	Predoi, D; Iconaru, SL; Predoi, MV; Stan, GE; Buton, N	3.504	0.696	10.3390/nano9091295	Q1

	Suspensions						
21.	Conductance Model for Single-Crystalline/Compact Metal Oxide Gas-Sensing Layers in the Nondegenerate Limit: Example of Epitaxial SnO ₂ (101)	<i>ACS SENSORS</i> , 4 , pp.2420-2428 (2019)	Simion, CE; Schipani, F; Papadogianni, A; Stanoiu, A; Budde, M; Oprea, A; Weimar, U; Bierwagen, O; Barsan, N	5.711	1.316	10.1021/acssensors.9b01018	Q1
22.	Cavity-Photon-Induced High-Order Transitions between Ground States of Quantum Dots	<i>ANNALEN DER PHYSIK</i> ,,1900306 ()	Gudmundsson, V; Abdullah, NR; Tang, CS; Manolescu, A; Moldoveanu, V	2.557	1.096	10.1002/andp.201900306	Q1
23.	Formation peculiarities and optical properties of highly-doped (Y(0.86)La(0.09)Vb(0.05))(2)O-3 transparent ceramics	<i>CERAMICS INTERNATIONAL</i> , 45 , pp.16002-16007 (2019)	Kryzhanovska, OS; Baumer, VN; Parkhomenko, SV; Doroshenko, AG; Yavetskiy, RP; Balabanov, AE; Tolmachev, AV; Skorik, SN; Li, J; Kuncser, A	3.057	0.437	10.1016/j.ceramint.2019.05.111	Q1
24.	Nanoclustered Pd decorated nanocrystalline Zn doped SnO ₂ for ppb NO ₂ detection at low temperature	<i>SENSORS AND ACTUATORS B-CHEMICAL</i> , 294 , pp.148-156 (2019)	Somacescu, S; Ghica, C; Simion, CE; Kuncser, AC; Vlaicu, AM; Stefan, M; Ghica, D; Florea, OG; Mercioniu, IF; Stanoiu, A	5.667	0.787	10.1016/j.snb.2019.05.033	Q1
25.	Spectroscopic investigations of Pr ³⁺ ions doped CNGG and CLNGG single crystals	<i>JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS</i> , 799 , pp.288-301 (2019)	Hau, S; Gheorghe, C; Gheorghe, L; Voicu, E; Greculeasa, M; Stanciu, G; Broasca, A; Enculescu, M	3.779	0.574	10.1016/j.jallcom.2019.05.154	Q1
26.	Memcomputing and Nondestructive Reading in Functional Ferroelectric Heterostructures	<i>PHYSICAL REVIEW APPLIED</i> , 12 ,024053 (2019)	Boni, GA; Filip, LD; Chirila, C; Iuga, A; Pasuk, I; Hrib, L; Trupina, L; Pintilie, I; Pintilie, L	4.782	2.124	10.1103/PhysRevApplied.12.024053	Q1
27.	Nanostructured palladium doped nickel electrodes for immobilization of oxidases through nickel nanoparticles	<i>ELECTROCHIMICA ACTA</i> , 315 , pp.102-113 (2019)	Barsan, MM; Matei, E; Enculescu, M; Costescu, R; Preda, N; Enache, TA; Enculescu, I; Diculescu, VC	5.116	0.832	10.1016/j.electacta.2019.04.143	Q1
28.	Adsorption of 1,4-phenylene diisothiocyanate onto the graphene oxide sheets functionalized with polydiphenylamine in	<i>SCIENTIFIC REPORTS</i> , 9 ,11968 (2019)	Baibarac, M; Daescu, M; Fejer, SN	4.122	1.356	10.1038/s41598-019-48314-x	Q1

	doped state						
29.	Carbon-based sprayed electrodes for pyroelectric applications	<i>PLOS ONE</i> , 14 ,e0221108 (2019)	Chirila, C; Botea, M; Iuga, A; Tomulescu, AG; Balescu, L; Galca, AC; Boni, AG; Leonat, L; Pintilie, I; Pintilie, L	2.766	1.000	10.1371/journal.pone.0221108	Q1
30.	Mineralization-Inspired Synthesis of Magnetic Zeolitic Imidazole Framework Composites	<i>ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION</i> , 58 , pp.13550-13555 (2019)	Terzopoulou, A; Hoop, M; Chen, XZ; Hirt, AM; Charilaou, M; Shen, Y; Mushtaq, F; del Pino, AP; Logofatu, C; Simonelli, L; de Mello, AJ; Doonan, CJ; Sort, J; Nelson, BJ; Pane, S; Puigmarti-Luis, J	12.102	3.376	10.1002/anie.201907389	Q1
31.	Nitrogen-doped graphene as metal free basic catalyst for coupling reactions	<i>JOURNAL OF CATALYSIS</i> , 376 , pp.238-247 (2019)	Candu, N; Man, I; Simion, A; Cojocaru, B; Coman, SM; Bucur, C; Primo, A; Garcia, H; Parvulescu, VI	6.759	1.595	10.1016/j.jcat.2019.07.011	Q1
32.	Dramatic impact of pressure and annealing temperature on the properties of sputtered ferroelectric HZO layers	<i>APL MATERIALS</i> , 7 ,081109 (2019)	Bouaziz, J; Romeo, PR; Baboux, N; Negrea, R; Pintilie, L; Vilquin, B	4.127	1.497	10.1063/1.5110894	Q1
33.	Fabrication of graphene-based electrochemical capacitors through reactive inverse matrix assisted pulsed laser evaporation	<i>APPLIED SURFACE SCIENCE</i> , 484 , pp.245-256 (2019)	del Pino, AP; Ramadan, MA; Lebiere, PG; Ivan, R; Logofatu, C; Yousef, I; Gyorgy, E	4.439	0.627	10.1016/j.apusc.2019.04.127	Q1
34.	3D hybrid structures based on biomimetic membranes and <i>Caryophyllus aromaticus</i> - "green" synthesized nano-silver with improved bioperformances	<i>MATERIALS SCIENCE & ENGINEERING C-MATERIALS FOR BIOLOGICAL APPLICATIONS</i> , 101 , pp.120-137 (2019)	Barbinta-Patrascu, ME; Badea, N; Bacalum, M; Ungureanu, C; Suica-Bunghez, IR; Lordache, SM; Pirvu, C; Zgura, I; Maraloiu, VA	5.080	0.694	10.1016/j.msec.2019.03.069	Q1
35.	Physical properties of the ferroelectric capacitors based on Al-doped HfO2 grown via Atomic Layer Deposition on Si	<i>APPLIED SURFACE SCIENCE</i> , 483 , pp.324-333 (2019)	Vulpe, S; Nastase, F; Dragoman, M; Dinescu, A; Romanitan, C; Iftimie, S; Moldovan, A; Apostol, N	4.439	0.627	10.1016/j.apusc.2019.03.166	Q1
36.	Rapid thermal annealing for high-quality ITO thin films deposited by radio-	<i>BEILSTEIN JOURNAL OF NANOTECHNOLOGY</i> ,	Prepelita, P; Stavarache, I; Craciun, D; Garoi,	2.968	0.745	10.3762/bjnano.10.149	Q1

	frequency magnetron sputtering	10 , pp.1511-1522 (2019)	F; Negrila, C; Sbarcea, BG; Craciun, V				
37.	Ge nanoparticles in SiO ₂ for near infrared photodetectors with high performance	<i>SCIENTIFIC REPORTS</i> , 9 ,10286 (2019)	Stavarache, I; Teodorescu, VS; Prepelita, P; Logofatu, C; Ciurea, ML	4.122	1.356	10.1038/s41598-019-46711-w	Q1
38.	Effect of Zn content on structural, morphological and magnetic behavior of Zn _x Co _{1-x} Fe ₂ O ₄ /SiO ₂ nanocomposites	<i>JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS</i> , 792 , pp.432-443 (2019)	Dippong, T; Deac, IG; Cadar, O; Levei, EA; Diamandescu, L; Borodi, G	3.779	0.574	10.1016/j.jallcom.2019.04.059	Q1
39.	Impact on Ferroelectricity and Band Alignment of Gradually Grown Au on BaTiO ₃	<i>PHYSICA STATUS SOLIDI-RAPID RESEARCH LETTERS</i> , 13 ,1900077 (2019)	Popescu, DG; Husanu, MA; Chirila, C; Pintilie, L; Teodorescu, CM	3.721	0.755	10.1002/pssr.201900077	Q1
40.	Evaluating the biological potential of some new cobalt (II) complexes with acrylate and benzimidazole derivatives	<i>APPLIED ORGANOMETALLIC CHEMISTRY</i> , 33 ,e4976 (2019)	Vlaicu, ID; Olar, R; Maxim, C; Chifiriuc, MC; Bleotu, C; Stanica, N; Scaeteanu, GV; Dulea, C; Avram, S; Badea, M	3.581	0.352	10.1002/aoc.4976	Q1
41.	Electrochemical assay for 20S proteasome activity and inhibition with anticancer drugs	<i>TALANTA</i> , 199 , pp.32-39 (2019)	de Jesus, CSH; Chiorcea-Paquim, AM; Barsan, MM; Diculescu, VC	4.244	0.738	10.1016/j.talanta.2019.02.052	Q1
42.	The influence of the nanocrystals size and surface on the Yb/Er doped LaF ₃ luminescence properties	<i>JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS</i> , 791 , pp.1098-1104 (2019)	Secu, CE; Matei, E; Negrila, C; Secu, M	3.779	0.574	10.1016/j.jallcom.2019.03.267	Q1
43.	On the relaxation time of interacting superparamagnetic nanoparticles and implications for magnetic fluid hyperthermia	<i>BEILSTEIN JOURNAL OF NANOTECHNOLOGY</i> , 10 , pp.1280-1289 (2019)	Kuncser, A; Iacob, N; Kuncser, VE	2.968	0.745	10.3762/bjnano.10.127	Q1
44.	Enhanced photoconductivity of embedded SiGe nanoparticles by hydrogenation	<i>APPLIED SURFACE SCIENCE</i> , 479 , pp.403-409 (2019)	Sultan, MT; Gudmundsson, JT; Manolescu, A; Stoica, T; Ciurea, ML; Svavarsson, HG	4.439	0.627	10.1016/j.apusc.2019.02.096	Q1
45.	Multilayer protective coatings obtained by pulsed laser deposition	<i>APPLIED SURFACE SCIENCE</i> , 479 , pp.1124-1131 (2019)	Ion, V; Scarisoreanu, ND; Bonciu, A; Moldovan, A; Ghenescu, V; Ghenescu, M; Banciu, MG; Andrei, A; Dinescu, M	4.439	0.627	10.1016/j.apusc.2019.02.186	Q1

46.	Direct Immobilization of Biomolecules through Magnetic Forces on Ni Electrodes via Ni Nanoparticles: Applications in Electrochemical Biosensors	<i>ACS APPLIED MATERIALS & INTERFACES</i> , 11 , pp.19867-19877 (2019)	Barsan, MM; Enache, TA; Preda, N; Stan, G; Apostol, NG; Matei, E; Kuncser, A; Diculescu, VC	8.097	1.634	10.1021/acsa mi.9b04990	Q1
47.	Structure and magnetic properties of highly coercive L1(0) nanocomposite FeMnPt thin films	<i>MATERIALS CHARACTERIZATION</i> , 152 , pp.245-252 (2019)	Crisan, O; Vasiliu, F; Crisan, AD; Mercioniu, I; Schinteie, G; Leca, A	2.892	0.692	10.1016/j.matchar.2019.04.028	Q1
48.	Hybrid layered double hydroxides-curcumin thin films deposited via Matrix Assisted Pulsed Laser Evaporation-MAPLE with photoluminescence properties	<i>APPLIED SURFACE SCIENCE</i> , 478 , pp.754-761 (2019)	Andrei, F; Vlad, A; Birjega, R; Tozar, T; Secu, M; Urzica, I; Dinescu, M; Zavoianu, R	4.439	0.627	10.1016/j.apusc.2019.02.011	Q1
49.	Effect of nickel content on structural, morphological and magnetic properties of Ni _x Co _{1-x} Fe ₂ O ₄ /SiO ₂ nanocomposites	<i>JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS</i> , 786 , pp.330-340 (2019)	Dippong, T; Levei, EA; Cadar, O; Deac, IG; Diamandescu, L; Barbu-Tudoran, L	3.779	0.574	10.1016/j.jallcom.2019.01.363	Q1
50.	CO ₂ methanation catalyzed by oriented MoS ₂ nanoplatelets supported on few layers graphene	<i>APPLIED CATALYSIS B-ENVIRONMENTAL</i> , 245 , pp.351-359 (2019)	Primo, A; He, JB; Jurca, B; Cojocaru, B; Bucur, C; Parvulescu, VI; Garcia, H	11.698	1.664	10.1016/j.apcatb.2018.12.034	Q1
51.	Highly -sensitive near infrared luminescent nanothermometers based on binary mixture	<i>JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS</i> , 785 , pp.250-259 (2019)	Avram, D; Colbea, C; Florea, M; Tiseanu, C	3.779	0.574	10.1016/j.jallcom.2019.01.162	Q1
52.	The hysteresis-free behavior of perovskite solar cells from the perspective of the measurement conditions	<i>JOURNAL OF MATERIALS CHEMISTRY C</i> , 7 , pp.5267-5274 (2019)	Nemnes, GA; Besleaga, C; Tomulescu, AG; Leonat, LN; Stancu, V; Florea, M; Manolescu, A; Pintilie, I	5.976	1.133	10.1039/c8tc05999c	Q1
53.	La _{0.75} Sr _{0.25} XO ₃ (X = Fe, Mn or Cr) with coking tolerance for CH ₄ /H ₂ O reaction: effect of H ₂ S on catalytic performance	<i>CATALYSIS SCIENCE & TECHNOLOGY</i> , 9 , pp.2351-2366 (2019)	Florea, M; Somacescu, S; Postole, G; Urda, A; Neatu, F; Neatu, S; Massin, L; Gelin, P	5.365	1.105	10.1039/c9cy00065h	Q1
54.	Tailoring the Dopant Distribution in ZnO:Mn Nanocrystals	<i>SCIENTIFIC REPORTS</i> , 9 ,6894 (2019)	Ghica, D; Vlaicu, ID; Stefan, M; Maraloiu, VA; Joita, AC; Ghica, C	4.122	1.356	10.1038/s41598-019-43388-z	Q1
55.	Dextran-Coated Zinc-Doped Hydroxyapatite for Biomedical Applications	<i>POLYMERS</i> , 11 ,886 (2019)	Predoi, D; Iconaru, SL; Predoi, MV	2.935	0.700	10.3390/poly11050886	Q1
56.	Pulsed Laser Fabrication of	<i>NANOMATERIALS</i> , 9 ,7	Lungu, J; Socol, G;	3.504	0.696	10.3390/nan	Q1

	TiO ₂ Buffer Layers for Dye Sensitized Solar Cells	46 (2019)	Stan, GE; Stefan, N; Luculescu, C; Georgescu, A; Popescu-Pelin, G; Prodan, G; Girtu, MA; Mihailescu, IN			o9050746	
57.	Multiferroic (Nd,Fe)-doped PbTiO ₃ ceramics with coexistent ferroelectricity and magnetism at room temperature	<i>CERAMICS INTERNATIONAL</i> , 45 , pp.9390-9396 (2019)	Craciun, F; Cordero, F; Cernea, M; Fruth, V; Atkinson, I; Stanica, N; Vasile, BS; Trusca, R; Iuga, A; Galizia, P; Galassi, C	3.057	0.437	10.1016/j.ceramint.2018.08.147	Q1
58.	Deposition temperature influence on the wear behaviour of carbon-based coatings deposited on hardened steel	<i>APPLIED SURFACE SCIENCE</i> , 475 , pp.762-773 (2019)	Feldiorean, D; Cristea, D; Tierenan, M; Croitoru, C; Gabor, C; Jakab-Farkas, L; Cunha, L; Barradas, NP; Alves, E; Craciun, V; Marin, A; Moura, C; Leme, J; Socol, M; Craciun, D; Cosnita, M; Munteanu, D	4.439	0.627	10.1016/j.apusc.2019.01.028	Q1
59.	Negative ion-induced deuterium retention in mixed W-Al layers co-deposited in dual-HiPIMS	<i>SURFACE & COATINGS TECHNOLOGY</i> , 363 , pp.273-281 (2019)	Dinca, P; Tiron, V; Velicu, IL; Porosnicu, C; Butoi, B; Velea, A; Grigore, E; Costin, C; Lungu, CP	2.906	0.517	10.1016/j.surfcoat.2019.02.019	Q1
60.	Growth of Ag(111) on Si(111) with nearly flat band and abrupt interface	<i>APPLIED SURFACE SCIENCE</i> , 473 , pp.433-441 (2019)	Bocirnea, AE; Costescu, RM; Apostol, NG; Teodorescu, CM	4.439	0.627	10.1016/j.apusc.2018.12.167	Q1
61.	New electrochemical sensor based on CoQ(10) and cyclodextrin complexes for the detection of oxidative stress initiators	<i>ELECTROCHIMICA ACTA</i> , 302 , pp.441-448 (2019)	Barsan, MM; Diculescu, VC	5.116	0.832	10.1016/j.electacta.2019.02.060	Q1
62.	Radial heterojunction based on single ZnO-CuxO core-shell nanowire for photodetector applications	<i>SCIENTIFIC REPORTS</i> , 9 ,5553 (2019)	Costas, A; Florica, C; Preda, N; Apostol, N; Kuncser, A; Nitescu, A; Enculescu, I	4.122	1.356	10.1038/s41598-019-42060-w	Q1
63.	Evaluation of Antibacterial Activity of Zinc-Doped Hydroxyapatite Colloids and Dispersion Stability Using Ultrasounds	<i>NANOMATERIALS</i> , 9 ,515 (2019)	Predoi, D; Iconaru, SL; Predoi, MV; Motelica-Heino, M; Guegan, R; Buton, N	3.504	0.696	10.3390/nano9040515	Q1
64.	Effect of the process control agent in the ball-	<i>POWDER TECHNOLOGY</i> , 347 ,	Mihalache, V; Mercioniu, I; Velea,	3.230	0.590	10.1016/j.powtec.2019.0	Q1

	milled powders and SPS-consolidation temperature on the grain refinement, density and Vickers hardness of Fe ₁₄ Cr ODS ferritic alloys	pp.103-113 (2019)	A; Palade, P			2.006	
65.	Next frontiers in cleaner synthesis: 3D printed graphene-supported CeZrLa mixed -oxide nanocatalyst for CO ₂ utilisation and direct propylene carbonate production	<i>JOURNAL OF CLEANER PRODUCTION</i> , 214 , pp.606-614 (2019)	Middelkoop, V; Slater, T; Florea, M; Neatu, F; Danaci, S; Onyenkeadi, V; Boonen, K; Saha, B; Baragau, LA; Kellici, S	5.651	0.815	10.1016/j.jclepro.2018.12.274	Q1
66.	Very large remanent polarization in ferroelectric Hf _{1-x} Zr _x O ₂ grown on Ge substrates by plasma assisted atomic oxygen deposition	<i>APPLIED PHYSICS LETTERS</i> , 114 , 112901 (2019)	Zacharaki, C; Tsipas, P; Chaitoglou, S; Fragkos, S; Axiotis, M; Lagoyiannis, A; Negrea, R; Pintilie, L; Dimoulas, A	3.495	0.927	10.1063/1.5090036	Q1
67.	Efficient glucose dehydration to HMF onto Nb-BEA catalysts	<i>CATALYSIS TODAY</i> , 325 , pp.109-116 (2019)	Candu, N; El Fergani, M; Verziu, M; Cojocaru, B; Jurca, B; Apostol, N; Teodorescu, C; Parvulescu, VI; Coman, SM	4.667	0.868	10.1016/j.cattod.2018.08.004	Q1
68.	Charge separation and ROS generation on tubular sodium titanates exposed to simulated solar light	<i>APPLIED SURFACE SCIENCE</i> , 470 , pp.1053-1063 (2019)	Preda, S; Anastasescu, C; Balint, I; Umek, P; Sluban, M; Negrila, CC; Angelescu, DG; Bratan, V; Rusu, A; Zaharescu, M	4.439	0.627	10.1016/j.apsusc.2018.11.194	Q1
69.	Coexisting spin and Rabi oscillations at intermediate time regimes in electron transport through a photon cavity	<i>BEILSTEIN JOURNAL OF NANOTECHNOLOGY</i> , 10 , pp.606-616 (2019)	Gudmundsson, V; Gestsson, H; Abdullah, NR; Tang, CS; Manolescu, A; Moldoveanu, V	2.968	0.745	10.3762/bjnano.10.61	Q1
70.	Antibacterial efficiency of alkali-free bio-glasses incorporating ZnO and/or SrO as therapeutic agents	<i>CERAMICS INTERNATIONAL</i> , 45 , pp.4368-4380 (2019)	Popa, AC; Fernandes, HR; Neculescu, M; Luculescu, C; Cioanher, M; Dumitru, V; Stuart, BW; Grant, DM; Ferreira, JMF; Stan, GE	3.057	0.437	10.1016/j.ceramint.2018.11.112	Q1
71.	Enhanced photoconductivity of SiGe nanocrystals in SiO ₂ driven by mild annealing	<i>APPLIED SURFACE SCIENCE</i> , 469 , pp.870-878 (2019)	Sultan, MT; Manolescu, A; Gudmundsson, JT; Torfason, K;	4.439	0.627	10.1016/j.apsusc.2018.11.061	Q1

			Nemnes, GA; Stavarache, I; Logofatu, C; Teodorescu, VS; Ciurea, ML; Svavarsson, HG				
72.	Energy-enhanced deposition of copper thin films by bipolar high power impulse magnetron sputtering	<i>SURFACE & COATINGS TECHNOLOGY</i> , 359 , pp.97-107 (2019)	Velicu, IL; Ianos, GT; Porosnicu, C; Mihaila, I; Burducea, I; Velea, A; Cristea, D; Munteanu, D; Tiron, V	2.906	0.517	10.1016/j.surfcoat.2018.12.079	Q1
73.	Highly transparent Yb:Y2O3 ceramics obtained by solid-state reaction and combined sintering procedures	<i>CERAMICS INTERNATIONAL</i> , 45 , pp.3217-3222 (2019)	Stanciu, G; Gheorghe, L; Voicu, F; Hau, S; Gheorghe, C; Croitoru, G; Enculescu, M; Yavetskiy, RP	3.057	0.437	10.1016/j.ceramint.2018.10.224	Q1
74.	N-Doped Defective Graphene from Biomass as Catalyst for CO2 Hydrogenation to Methane	<i>CHEMCATCHEM</i> , 11 , pp.985-990 (2019)	Jurca, B; Bucur, C; Primo, A; Concepcion, P; Parvulescu, VI; Garcia, H	4.674	1.055	10.1002/cctc.201801984	Q1
75.	Electrochemical Sensor for Carbonyl Groups in Oxidized Proteins	<i>ANALYTICAL CHEMISTRY</i> , 91 , pp.1920-1927 (2019)	Enache, TA; Matei, E; Diculescu, VC	6.042	1.371	10.1021/acs.analchem.8b03969	Q1
76.	Rhodium-Catalyzed Annulation of ortho-Alkenyl Anilides with Alkynes: Formation of Unexpected Naphthalene Adducts	<i>ANGEWANDTE CHEMIE-INTERNATIONAL EDITION</i> , 58 , pp.1700-1704 (2019)	Seoane, A; Comanescu, C; Casanova, N; Garcia-Fandino, R; Diz, X; Mascarenas, JL; Gulias, M	12.102	3.376	10.1002/anie.201811747	Q1
77.	Laser Processed Antimicrobial Nanocomposite Based on Polyaniline Grafted Lignin Loaded with Gentamicin-Functionalized Magnetite	<i>POLYMERS</i> , 11 ,283 (2019)	Visan, AI; Popescu-Pelin, G; Gherasim, O; Grumezescu, V; Socol, M; Zgura, I; Florica, C; Popescu, RC; Savu, D; Holban, AM; Cristescu, R; Matei, CE; Socol, G	2.935	0.700	10.3390/poly111020283	Q1
78.	Growth of SrTiO3 Single Crystals with a Diameter of about 30 mm by the Verneuil Method	<i>CRYSTAL GROWTH & DESIGN</i> , 19 , pp.604-612 (2019)	Tateno, Y; Endo, K; Arisawa, S; Vlaicu, AM; Nedelcu, L; Preda, N; Secu, M; Iordanescu, R; Kuncser, AC; Badica, P	3.972	0.777	10.1021/acs.cgd.8b01004	Q1
79.	Voltammetric and mass spectrometry investigation of methionine oxidation	<i>JOURNAL OF ELECTROANALYTICAL CHEMISTRY</i> , 834 , pp.124-129 (2019)	Diculescu, VC; Enache, TA	3.235	0.489	10.1016/j.jelechem.2018.12.058	Q1
80.	Stable Hall voltages in	<i>ORGANIC</i>	Stadler, P; Leonat,	3.680	0.652	10.1016/j.or	Q1

	presence of dynamic quasi-continuum bands in poly (3,4-ethylene-dioxythiophene)	<i>ELECTRONICS</i> , 65 , pp.412-418 (2019)	LN; Menon, R; Coskun, H; van Frank, S; Rankl, C; Scharber, MC			gel.2018.12.001	
81.	Theoretical and Experimental Study of (Ba,Sr)TiO ₃ Perovskite Solid Solutions and BaTiO ₃ /SrTiO ₃ Heterostructures	<i>JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C</i> , 123 , pp.2031-2036 (2019)	Rusevich, LL; Zvejnieks, G; Kotomin, EA; Krzmann, MM; Meden, A; Kunej, S; Vlaicu, ID	4.484	1.105	10.1021/acs.jpcc.8b09750	Q1
82.	Pd-Cu catalysts supported on anion exchange resin for the simultaneous catalytic reduction of nitrate ions and reductive dehalogenation of organochlorinated pollutants from water	<i>APPLIED CATALYSIS A-GENERAL</i> , 570 , pp.120-129 (2019)	Bradu, C; Capat, C; Papa, F; Frunza, L; Olaru, EA; Crini, G; Morin-Crini, N; Euvrard, E; Balint, I; Zgura, I; Munteanu, C	4.521	0.777	10.1016/j.apcata.2018.11.002	Q1
83.	Unveiling the double-well energy landscape in a ferroelectric layer	<i>NATURE</i> , 565 , pp.464-+ (2019)	Hoffmann, M; Fengler, FPG; Herzig, M; Mittmann, T; Max, B; Schroeder, U; Negrea, R; Pintilie, L; Slesazek, S; Mikolajick, T	41.577	22.537	10.1038/s41586-018-0854-z	Q1
84.	Akermanite-based coatings grown by pulsed laser deposition for metallic implants employed in orthopaedics	<i>SURFACE & COATINGS TECHNOLOGY</i> , 357 , pp.1015-1026 (2019)	Negrea, R; Busuioc, C; Constantinoiu, I; Miu, D; Enache, C; Iordache, F; Jinga, SI	2.906	0.517	10.1016/j.surfcoat.2018.11.008	Q1
85.	Spirobifluorene-based Porous Organic Polymers as Efficient Porous Supports for Pd and Pt for Selective Hydrogenation	<i>CHEMCATCHEM</i> , 11 , pp.538-549 (2019)	Trandafir, MM; Pop, L; Hadade, ND; Hristea, I; Teodorescu, CM; Krumeich, F; van Bokhoven, JA; Grosu, I; Parvulescu, VI	4.674	1.055	10.1002/cctc.201801247	Q1
86.	NiTi coated with oxide and polymer films in the in vivo healing processes	<i>JOURNAL OF MATERIALS RESEARCH AND TECHNOLOGY-JMR&T</i> , 8 , pp.914-922 (2019)	Batalu, D; Nastase, F; Militaru, M; Gherghiceanu, M; Badica, P	3.398	Not Available	10.1016/j.jmrt.2018.06.015	Q1
87.	Near infrared emission properties of Er doped cubic sesquioxides in the second/third biological windows	<i>SCIENTIFIC REPORTS</i> , 8 ,18033 (2018)	Avram, D; Tiseanu, I; Vasile, BS; Florea, M; Tiseanu, C	4.122	1.356	10.1038/s41598-018-36639-y	Q1
88.	Full Tetragonal Phase Stabilization in ZrO ₂ Nanoparticles Using Wet Impregnation: Interplay of Host Structure, Dopant	<i>NANOMATERIALS</i> , 8 ,988 (2018)	Colbea, C; Avram, D; Cojocaru, B; Negrea, R; Ghica, C; Kessler, VG; Seisenbaeva, GA;	3.504	0.696	10.3390/nano8120988	Q1

	Concentration and Sensitivity of Characterization Technique		Parvulescu, V; Tiseanu, C				
89.	X Ray study of GZO thin films	<i>ACTA CRYSTALLOGRAPHICA A-FOUNDATION AND ADVANCES</i> , 74 , pp.E287-E287 (2018)	Sbarcea, BG; Prepelita, P; Leonat, LN	7.930	1.209	10.1107/S2053273318090848	Q1
90.	Reticulated Mesoporous TiO2 Scaffold, Fabricated by Spray Coating, for Large-Area Perovskite Solar Cells	<i>ENERGY TECHNOLOGY</i> ,UNSP 1900922 ()	Tomulescu, AG; Stancu, V; Besleaga, C; Enculescu, M; Nemnes, GA; Florea, M; Dumitru, V; Pintilie, L; Pintilie, I; Leonat, L	3.175	0.656	10.1002/ente.201900922	Q2
91.	Photoluminescence and thermoluminescence properties of the Sr3Al2O6:Eu3+/Eu2+,Tb3+ persistent phosphor	<i>JOURNAL OF LUMINESCENCE</i> , 214 , 116540 (2019)	Gingasu, D; Mindru, I; Ianculescu, A; Preda, S; Negrila, C; Secu, M	2.732	0.423	10.1016/j.jlumin.2019.116540	Q2
92.	Photoluminescence and structural properties of the nitrogen doped TiO2 and the influence of SiO2 and Ag nanoparticles	<i>JOURNAL OF PHYSICS-CONDENSED MATTER</i> , 31 ,375201 (2019)	Nila, A; Baibarac, M; Udrescu, A; Smaranda, I; Mateescu, A; Mateescu, G; Mereuta, P; Negrila, CC	2.617	0.805	10.1088/1361-648X/ab2692	Q2
93.	Backaction effects in cavity-coupled quantum conductors	<i>PHYSICAL REVIEW B</i> , 100 ,125416 (2019)	Moldoveanu, V; Dinu, IV; Manolescu, A; Gudmundsson, V	3.813	1.142	10.1103/PhysRevB.100.125416	Q2
94.	Probing single-unit-cell resolved electronic structure modulations in oxide superlattices with standing-wave photoemission	<i>PHYSICAL REVIEW B</i> , 100 ,125119 (2019)	Yang, W; Chandrasena, RU; Gu, M; dos Reis, RMS; Moon, EJ; Arab, A; Husanu, MA; Nemsak, S; Gullikson, EM; Ciston, J; Strocov, VN; Rondinelli, JM; May, SJ; Gray, AX	3.813	1.142	10.1103/PhysRevB.100.125119	Q2
95.	Study of the Structure and Antimicrobial Activity of Ca-Deficient Ceramics on Chlorhexidine Nanoclay Substrate	<i>MATERIALS</i> , 12 ,2996 (2019)	Pazourkova, L; Reli, M; Hundakova, M; Pazdziora, E; Predoi, D; Martynkova, GS; Lafdi, K	2.467	0.625	10.3390/materials12182996	Q2
96.	3D Superparamagnetic Scaffolds for Bone Mineralization under Static Magnetic Field Stimulation	<i>MATERIALS</i> , 12 ,2834 (2019)	Paun, IA; Calin, BS; Mustaciosu, CC; Mihailescu, M; Moldovan, A;	2.467	0.625	10.3390/materials12172834	Q2

			Crisan, O; Leca, A; Luculescu, CR				
97.	The influence of UV light on the azathioprine photodegradation: New evidences by photoluminescence	<i>RESULTS IN PHYSICS</i> , 14 ,102443 (2019)	Smaranda, I; Nila, A; Manta, CM; Samohvalov, D; Gherca, D; Baibarac, M	2.147	0.278	10.1016/j.rinp.2019.102443	Q2
98.	Physical properties of Cu and Dy co-doped ZnO thin films prepared by radio frequency magnetron sputtering for hybrid organic/inorganic electronic devices	<i>THIN SOLID FILMS</i> , 685 , pp.379-384 (2019)	Locovei, C; Coman, D; Radu, A; Ion, L; Antohe, VA; Vasile, N; Dumitru, A; Iftimie, S; Antohe, S	1.939	0.356	10.1016/j.tsf.2019.06.027	Q2
99.	Crystallization processes in europium-doped Bi ₄ Ge ₃ O ₁₂ glass materials	<i>JOURNAL OF LUMINESCENCE</i> , 213 , pp.235-240 (2019)	Polosan, S	2.732	0.423	10.1016/j.jlumin.2019.05.031	Q2
100.	Generalized Master Equation Approach to Time-Dependent Many-Body Transport	<i>ENTROPY</i> , 21 ,731 (2019)	Moldoveanu, V; Manolescu, A; Gudmundsson, V	2.305	0.564	10.3390/e21080731	Q2
101.	Formation of a Bistable Interstitial Complex in Irradiated p-Type Silicon	<i>PHYSICA STATUS SOLIDI A-APPLICATIONS AND MATERIALS SCIENCE</i> , 216 ,1900354 (2019)	Makarenko, LF; Lastovski, SB; Yakushevich, HS; Gaubas, E; Pavlov, J; Kozlovski, VV; Moll, M; Pintilie, I	1.795	0.392	10.1002/pssa.201900354	Q2
102.	Annealing of preexisting defects in silicon single crystals by ion irradiation	<i>NUCLEAR INSTRUMENTS & METHODS IN PHYSICS RESEARCH SECTION B-BEAM INTERACTIONS WITH MATERIALS AND ATOMS</i> , 450 , pp.85-89 (2019)	Mihai, MD; Ionescu, P; Pantelica, D; Petrascu, H; Craciun, D; Craciun, V; Vasiliu, F; Vasile, BS; Mercioniu, I	1.323	0.367	10.1016/j.nimb.2018.09.005	Q2
103.	The Quality of Fe ₁₄ Cr ODS Powder Alloys During Milling and Upon Heating and Its Impact on the Mechanical Properties of Consolidated Steels	<i>METALLURGICAL AND MATERIALS TRANSACTIONS A-PHYSICAL METALLURGY AND MATERIALS SCIENCE</i> , 50A , pp.3282-3294 (2019)	Mihalache, V; Walter, M; Mercioniu, I; Ordas, N	1.887	0.554	10.1007/s11661-019-05264-3	Q2
104.	Structural, electric and pyroelectric properties of up and down graded PZT multilayers	<i>CURRENT APPLIED PHYSICS</i> , 19 , pp.804-810 (2019)	Botea, M; Hrib, L; Pasuk, I; Iuga, A; Trupina, L; Negrea, R; Becherescu, N; Pintilie, L	2.058	0.417	10.1016/j.capp.2019.04.010	Q2
105.	Effect of dilute doping and non-equilibrium synthesis on the structural, luminescent and magnetic properties of nanocrystalline Zn _{1-x} Ni _x O	<i>MATERIALS RESEARCH BULLETIN</i> , 115 , pp.37-48 (2019)	Mihalache, V; Negrila, C; Bercu, V; Secu, M; Vasile, E; Stan, GE	2.873	0.407	10.1016/j.materbull.2019.03.001	Q2

	(x=0.0025-0.03)						
106.	Gd ³⁺ co-doping influence on the morphological, up-conversion luminescence and magnetic properties of LiYF ₄ :Yb ³⁺ /Er ³⁺ nanocrystals	<i>JOURNAL OF PHYSICS AND CHEMISTRY OF SOLIDS</i> , 130 , pp.236-241 (2019)	Secu, CE; Bartha, C; Matei, E; Negrila, C; Crisan, A; Secu, M	2.207	0.371	10.1016/j.jpss.2019.03.003	Q2
107.	Structural Change in Ni-Fe-Ga Magnetic Shape Memory Alloys after Severe Plastic Deformation	<i>MATERIALS</i> , 12 ,1939 (2019)	Gurau, G; Gurau, C; Tolea, F; Sampath, V	2.467	0.625	10.3390/materials20190302121939	Q2
108.	Effect of high gamma radiations on physical properties of In ₂ S ₃ thin films grown by chemical bath deposition for buffer layer applications	<i>RESULTS IN PHYSICS</i> , 13 ,102115 (2019)	Souli, M; Bensalem, Y; Secu, M; Bartha, C; Enculescu, M; Mejri, A; Kamoun-Turki, N; Badica, P	2.147	0.278	10.1016/j.rinp.2019.02.051	Q2
109.	Bulk Versus Surface Modification of Alumina with Mn and Ce Based Oxides for CH ₄ Catalytic Combustion	<i>MATERIALS</i> , 12 ,1771 (2019)	Neatu, S; Trandafir, MM; Stanoiu, A; Florea, OG; Simion, CE; Leonat, LN; Cobianu, C; Gheorghe, M; Florea, M; Neatu, F	2.467	0.625	10.3390/materials20190302111771	Q2
110.	Peppermint Essential Oil-Doped Hydroxyapatite Nanoparticles with Antimicrobial Properties	<i>MOLECULES</i> , 24 ,2169 (2019)	Badea, ML; Iconaru, SL; Groza, A; Chifiriuc, MC; Beuran, M; Predoi, D	3.098	0.631	10.3390/molecules20190302112169	Q2
111.	Polarization branches and optimization calculation strategy applied to ABO(3) ferroelectrics	<i>MODELLING AND SIMULATION IN MATERIALS SCIENCE AND ENGINEERING</i> , 27 ,045008 (2019)	Filip, LD; Plugaru, N; Pintilie, L	1.793	0.785	10.1088/1361-651X/ab146e	Q2
112.	The Influence of Heteroatom Dopants Nitrogen, Boron, Sulfur, and Phosphorus on Carbon Electrocatalysts for the Oxygen Reduction Reaction	<i>CHEMPLUSCHEM</i> , 84 , pp.457-464 (2019)	Preuss, K; Siwoniku, AM; Bucur, CI; Titirici, MM	3.205	0.609	10.1002/cplu.201900083	Q2
113.	Sub-lattice polarization states in anti-ferroelectrics and their relaxation process	<i>CURRENT APPLIED PHYSICS</i> , 19 , pp.651-656 (2019)	Vopson, MM; Tan, X; Namvar, E; Belusky, M; Thompson, SP; Kuncser, V; Plazaola, F; Unzueta, I; Tang, CC	2.058	0.417	10.1016/j.capp.2019.03.009	Q2
114.	Enhancement in magnetic and dielectric properties of the ruthenium-doped copper ferrite(Ru - CuFe ₂ O ₄) nanoparticles	<i>JOURNAL OF MAGNETISM AND MAGNETIC MATERIALS</i> , 476 , pp.18-23 (2019)	Manikandan, V; Kuncser, V; Vasile, B; Kavita, S; Vigneselman, S; Mane, RS	3.046	0.466	10.1016/j.jmmm.2018.12.050	Q2

115.	Epitaxial Non c-Axis Twin-Free Bi ₂ Sr ₂ CaCu ₂ O ₈ + Thin Films for Future THz Devices	<i>MATERIALS</i> , 12 ,1124 (2019)	Endo, K; Arisawa, S; Badica, P	2.467	0.625	10.3390/ma12071124	Q2
116.	Presence and distribution of impurity defects in crystalline cubic boron nitride. A spectroscopic study	<i>RADIATION MEASUREMENTS</i> , 123 , pp.21-25 (2019)	Nistor, SV; Nistor, LC; Joita, AC; Vlaicu, AM	1.369	0.380	10.1016/j.radmeas.2019.02.003	Q2
117.	Structure of defects in semiconductor crystalline cubic boron nitride. A microstructural and micro analytical investigation	<i>RADIATION MEASUREMENTS</i> , 123 , pp.78-82 (2019)	Nistor, LC; Vlaicu, AM; Nistor, SV	1.369	0.380	10.1016/j.radmeas.2019.02.019	Q2
118.	Spontaneous symmetry breaking in the laser transition	<i>PHYSICAL REVIEW B</i> , 99 ,115313 (2019)	Gartner, P	3.813	1.142	10.1103/PhysRevB.99.115313	Q2
119.	Prototype Orthopedic Bone Plates 3D Printed by Laser Melting Deposition	<i>MATERIALS</i> , 12 ,906 (2019)	Chioibas, D; Achim, A; Popescu, C; Stan, GE; Pasuk, I; Enculescu, M; Iosub, S; Duta, L; Popescu, A	2.467	0.625	10.3390/ma12060906	Q2
120.	Fabrication and characterization of Ru-doped LiCuFe ₂ O ₄ nanoparticles and their capacitive and resistive humidity sensor applications	<i>JOURNAL OF MAGNETISM AND MAGNETIC MATERIALS</i> , 474 , pp.563-569 (2019)	Manikandan, V; Tudorache, F; Petrila, J; Mane, RS; Kuncser, V; Vasile, B; Morgan, D; Vigneselman, S; Mirzaei, A	3.046	0.466	10.1016/j.jmm.2018.11.072	Q2
121.	Behavior of Molybdenum-Vanadium Mixed Oxides in Selective Oxidation and Disproportionation of Toluene	<i>MATERIALS</i> , 12 ,748 (2019)	Mitran, G; Neatu, F; Pavel, OD; Trandafir, MM; Florea, M	2.467	0.625	10.3390/ma12050748	Q2
122.	Passive magnetic shielding by machinable MgB ₂ bulks: measurements and numerical simulations	<i>SUPERCONDUCTOR SCIENCE & TECHNOLOGY</i> , 32 ,034004 (2019)	Gozzelino, L; Gerbaldo, R; Ghigo, G; Laviano, F; Torsello, D; Bonino, V; Truccato, M; Batalu, D; Grigoroscuta, MA; Burdusel, M; Aldica, GV; Badica, P	2.861	0.821	10.1088/1361-6668/aaf99e	Q2
123.	Zinc Doped Hydroxyapatite Thin Films Prepared by Sol-Gel Spin Coating Procedure	<i>COATINGS</i> , 9 ,156 (2019)	Predoi, D; Iconaru, SL; Predoi, MV; Buton, N; Motelica-Heino, M	2.350	0.510	10.3390/coatings9030156	Q2
124.	Do topology and ferromagnetism cooperate at the EuS/Bi ₂ Se ₃ interface?	<i>PHYSICAL REVIEW B</i> , 99 ,064423 (2019)	Krieger, JA; Ou, Y; Caputo, M; Chikina, A; Dobeli, M; Husanu, MA;	3.813	1.142	10.1103/PhysRevB.99.064423	Q2

			Keren, I; Prokscha, T; Suter, A; Chang, CZ; Moodera, JS; Strocov, VN; Salman, Z				
125.	Naturally-Derived Biphasic Calcium Phosphates through Increased Phosphorus-Based Reagent Amounts for Biomedical Applications	<i>MATERIALS</i> , 12 ,381 (2019)	Mocanu, AC; Stan, GE; Maidaniuc, A; Miculescu, M; Antoniac, IV; Ciocoiu, RC; Voicu, SI; Mitran, V; Cimpean, A; Miculescu, F	2.467	0.625	10.3390/ma12030381	Q2
126.	Comparison between dielectric and pyroelectric properties of PZFNt and BST type ceramics	<i>PROCESSING AND APPLICATION OF CERAMICS</i> , 13 , pp.269-276 (2019)	Stancu, V; Amarande, L; Botea, M; Iuga, A; Leonat, LN; Tomulescu, AG; Cioangher, M; Balescu, LM; Pintilie, L	1.152	Not Available	10.2298/PAC1903269S	Q2
127.	Ferroelectric Field Effect Transistors Based on PZT and IGZO	<i>IEEE JOURNAL OF THE ELECTRON DEVICES SOCIETY</i> , 7 , pp.268-275 (2019)	Besleaga, C; Radu, R; Balescu, LM; Stancu, V; Costas, A; Dumitru, V; Stan, G; Pintilie, L	2.696	0.837	10.1109/JEDS.2019.2895367	Q2
128.	Composite BNT-BT0.08/CoFe2O4 with core-shell nanostructure for piezoelectric and ferromagnetic applications	<i>MATERIALS SCIENCE AND ENGINEERING B-ADVANCED FUNCTIONAL SOLID-STATE MATERIALS</i> , 240 , pp.7-15 (2019)	Cerneza, M; Vasile, BS; Ciuchi, IV; Surdu, VA; Bartha, C; Iuga, A; Galizia, P; Galassi, C	3.316	0.476	10.1016/j.mseb.2019.01.001	Q2
129.	Pulsed Laser Deposition of Indium Tin Oxide Thin Films on Nanopatterned Glass Substrates	<i>COATINGS</i> , 9 ,19 (2019)	Socol, M; Preda, N; Rasoga, O; Costas, A; Stanculescu, A; Breazu, C; Gherendi, F; Socol, G	2.350	0.510	10.3390/coatings9010019	Q2
130.	Room temperature ferromagnetism and its correlation to ferroelectricity of manganese embedded in lead zirco-titanate	<i>THIN SOLID FILMS</i> , 669 , pp.440-449 (2019)	Bucur, IC; Apostol, NG; Abramiuc, LE; Tanase, LC; Tache, CA; Lungu, GA; Costescu, RM; Chirila, CF; Trupina, L; Pintilie, L; Teodorescu, CM	1.939	0.356	10.1016/j.tsf.2018.11.018	Q2
131.	Bioactive Glasses and Glass-Ceramics for Healthcare Applications in Bone Regeneration and Tissue Engineering	<i>MATERIALS</i> , 11 ,2530 (2018)	Fernandes, HR; Gaddam, A; Rebelo, A; Brazete, D; Stan, GE; Ferreira, JMF	2.467	0.625	10.3390/ma11122530	Q2
132.	X-ray Crystal Structure, Geometric Isomerism, and Antimicrobial Activity of	<i>MOLECULES</i> , 23 ,3253 (2018)	Vlaicu, ID; Borodi, G; Scaeteanu, GV; Chifiriuc, MC;	3.098	0.631	10.3390/molecules23123253	Q2

	New Copper(II) Carboxylate Complexes with Imidazole Derivatives		Marutescu, L; Popa, M; Stefan, M; Mercioniu, IF; Maurer, M; Daniliuc, CG; Olar, R; Badea, M				
133.	Charge Transfer from Alq(3)-5Cl to Graphene Oxide in Donor-Acceptor Heterostructures	<i>JOURNAL OF ELECTRONIC MATERIALS</i> , 48 , pp.- (2019)	Polosan, S; Ciobotaru, CC; Ciobotaru, IC	1.566	0.302	10.1007/s11664-019-07531-w	Q3
134.	Structural and electronic properties of the alpha-GeSe surface	<i>SURFACE SCIENCE</i> , 686 , pp.17-21 (2019)	Jiao, Z; Yao, QR; Balescu, LM; Liu, QJ; Bin, T; Zandvliet, HJW	1.997	0.515	10.1016/j.susc.2019.03.007	Q3
135.	Tryptophan / Dextran70 Based-Fluorescent Silver Nanoparticles: Synthesis and Physicochemical Properties	<i>JOURNAL OF FLUORESCENCE</i> , 29 , pp.981-992 (2019)	Voicescu, M; Ionescu, S; Calderon-Moreno, JM; Teodorescu, VS; Anastasescu, M; Culita, DC	1.665	0.280	10.1007/s10895-019-02411-2	Q3
136.	A Dyson Equation for Non-Equilibrium Green's Functions in the Partition-Free Setting	<i>PHYSICA STATUS SOLIDI B-BASIC SOLID STATE PHYSICS</i> , 256 ,1800447 (2019)	Cornean, HD; Moldoveanu, V; Pillet, CA	1.729	0.412	10.1002/pssb.201800447	Q3
137.	Photoconductive Behavior of the PPV/RGO Composites: Insights of Charge Transfer Process	<i>PHYSICA STATUS SOLIDI B-BASIC SOLID STATE PHYSICS</i> , 256 ,1800392 (2019)	Ilie, M; Dragoman, D; Baibarac, M	1.729	0.412	10.1002/pssb.201800392	Q3
138.	Molecular scale biophysical methodologies for levo-thyroxine interaction with DNA	<i>EUROPEAN BIOPHYSICS JOURNAL WITH BIOPHYSICS LETTERS</i> , 48 , pp.S241-S241 (2019)	David, M; Enache, A; Moga, M; Florescu, M	1.935	0.482		Q3
139.	Structural and optical properties of ZnO thin films grown by rapid atmospheric mist chemical vapor technique	<i>OPTICAL AND QUANTUM ELECTRONICS</i> , 51 ,210 (2019)	Derbali, S; Nouneh, K; Galca, AC; Touhami, ME; Secu, M; Matei, E; Leonat, LN; Pintilie, L; El Harfaoui, N; Fahoume, M	1.168	0.196	10.1007/s11082-019-1937-2	Q3
140.	Interaction and Size Effects in Open Nano-Electromechanical Systems	<i>PHYSICA STATUS SOLIDI B-BASIC SOLID STATE PHYSICS</i> , 256 ,1800443 (2019)	Tanatar, B; Moldoveanu, V; Dragomir, R; Stanciu, S	1.729	0.412	10.1002/pssb.201800443	Q3
141.	Vibrational and photoluminescence properties of polydiphenylamine doped with silicotungstic acid heteropolyanions and their	<i>JOURNAL OF MOLECULAR STRUCTURE</i> , 1184 , pp.25-35 (2019)	Baibarac, M; Stroe, M; Fejer, SN	2.011	0.262	10.1016/j.molstruc.2019.02.014	Q3

	composites with reduced graphene oxide						
142.	Coordination polymers and a dinuclear complex constructed from zinc(II) ions and fluorescein: iodine adsorption and optical properties	<i>JOURNAL OF COORDINATION CHEMISTRY</i> , 72 , pp.1222-1237 (2019)	Raduca, M; Ene, CD; Ionescu, S; Florea, M; Madalan, AM	1.703	0.167	10.1080/00958972.2019.1605442	Q3
143.	Physical properties investigation of samarium doped calcium sulfate thin films under high gamma irradiations for space photovoltaic and dosimetric applications	<i>SUPERLATTICES AND MICROSTRUCTURES</i> , 126 , pp.103-119 (2019)	Souli, M; Reghima, M; Secu, M; Bartha, C; Enculescu, M; Mejri, A; Kamoun-Turki, N; Badica, P	2.099	0.333	10.1016/j.spmi.2018.12.021	Q3
144.	Multiferroic (Nd,Fe)-doped PbTiO ₃ thin films obtained by pulsed laser deposition	<i>APPLIED PHYSICS A-MATERIALS SCIENCE & PROCESSING</i> , 125 ,113 (2019)	Dumitru-Grivei, M; Ion, V; Birjega, R; Moldovan, A; Craciun, F; Cernea, M; Galassi, C; Dinescu, M	1.604	0.327	10.1007/s00339-019-2403-5	Q3
145.	PHOTO-ELECTRICAL PROPERTIES OF THIN FILMS WITH GE NANOPARTICLES EMBEDDED IN TiO ₂ MATRIX	<i>ROMANIAN REPORTS IN PHYSICS</i> , 71 ,504 (2019)	Stavarache, I; Maraloiu, VA	1.582	0.255		Q3
146.	Production and Structural Characterization of Some Magnesium Matrix Composites Reinforced with Amorphous/Nanocrystalline NiTi Particulates	<i>REVISTA DE CHIMIE</i> , 69 , pp.3503-3507 (2018)	Ciurdas, M; Neculescu, DA; Pantilimon, CM; Ion, V; Galatanu, M; Ruiu, G; Dumitrescu, RE	1.412	0.047		Q3
147.	Electronic phase separation at LaAlO ₃ /SrTiO ₃ interfaces tunable by oxygen deficiency	<i>PHYSICAL REVIEW MATERIALS</i> , 3 ,106001 (2019)	Strocov, VN; Chikina, A; Caputo, M; Husanu, MA; Bisti, F; Bracher, D; Schmitt, T; Granozio, FM; Vaz, CAF; Lechermann, F	Not Available	Not Available	10.1103/PhysRevMaterials.3.106001	Q4
148.	Effect of slow charged 90 keV Ne ⁸⁺ ions on zinc ferrite nanoparticles	<i>MATERIALS RESEARCH EXPRESS</i> , 6 ,095077 (2019)	Trandafir, EV; Caltun, OF; Ciocarlan, R; Pui, A; Hempelmann, R; Diamandescu, L; Cervera, S; Trassinelli, M; Vernhet, D	1.151	0.239	10.1088/2053-1591/ab3174	Q4
149.	STRUCTURAL EVOLUTION OF THE NiTi/NiFeGa SMART HYBRID MATERIAL DURING SEVERE	<i>DIGEST JOURNAL OF NANOMATERIALS AND BIOSTRUCTURES</i> , 14 , pp.539-546 (2019)	Gurau, C; Gurau, G; Tolea, F; Sampath, V	0.673	0.143		Q4

	PLASTIC DEFORMATION						
150.	Efficiency enhancement of iridium-based organometallic light emitting diodes	<i>MATERIALS RESEARCH EXPRESS</i> , 6 ,055104 (2019)	Polosan, S	1.151	0.239	10.1088/2053-1591/ab0625	Q4
151.	STRUCTURAL, DIELECTRIC AND PYROELECTRIC PROPERTIES OF Nb AND Fe DOPED PZT CERAMICS	<i>DIGEST JOURNAL OF NANOMATERIALS AND BIOSTRUCTURES</i> , 14 , pp.225-230 (2019)	Stancu, V; Amarande, L; Botea, M; Cioangher, M; Tomulescu, A; Iuga, A; Pintilie, L	0.673	0.143		Q4
152.	Martensitic transformation and related properties of Fe _{69.4} Pd _{30.6} ferromagnetic shape memory ribbons	<i>JOURNAL OF OPTOELECTRONICS AND ADVANCED MATERIALS</i> , 20 , pp.701-706 (2018)	Tolea, F; Sofronie, M	0.390	0.055		Q4
153.	CERAMIC THIN FILMS DEPOSITED BY SPIN COATING AS COATINGS FOR METALLIC IMPLANTS	<i>REVISTA ROMANA DE MATERIALE-ROMANIAN JOURNAL OF MATERIALS</i> , 48 , pp.401-406 (2018)	Busuioc, C; Constantinoiu, I; Enculescu, M; Beregoi, M; Jinga, SI	0.661	0.070		Q4
154.	GeSn Nanocrystals in GeSnSiO ₂ by Magnetron Sputtering for Short-Wave Infrared Detection	<i>ACS APPLIED NANO MATERIALS</i> , 2 , pp.3626-3635 (2019)	Slav, A; Palade, C; Logofatu, C; Dascalescu, I; Lepadatu, AM; Stavarache, I; Comanescu, F; Iftimie, S; Antohe, S; Lazanu, S; Teodorescu, VS; Buca, D; Ciurea, ML; Braic, M; Stoica, T	not available	not available	10.1021/acsnm.9b00571	not available
155.	Phase Control in Hafnia: New Synthesis Approach and Convergence of Average and Local Structure Properties	<i>ACS OMEGA</i> , 4 , pp.8881-8891 (2019)	Cojocar, B; Avram, D; Negrea, R; Ghica, C; Kessler, VG; Seisenbaeva, GA; Parvulescu, VI; Tiseanu, C	not available	not available	10.1021/acsomega.9b00580	not available
156.	Particularities of trichloroethylene photocatalytic degradation over crystalline RbLaTa ₂ O ₇ nanowire bundles grown by solid-state synthesis route	<i>JOURNAL OF ENVIRONMENTAL CHEMICAL ENGINEERING</i> , 7 , UNS P 102789 (2019)	Raciulete, M; Papa, F; Kawamoto, D; Munteanu, C; Culita, DC; Negrila, C; Atkinson, I; Bratan, V; Pandele-Cusu, J; Balint, I	not available	not available	10.1016/j.jecce.2018.11.034	not available
157.	Fe ₃ O ₄ /BaTiO ₃ COMPOSITES WITH CORE-SHELL STRUCTURE	<i>UNIVERSITY POLITEHNICA OF BUCHAREST SCIENTIFIC BULLETIN SERIES B-CHEMISTRY AND</i>	Tanasa, E; Andronescu, E; Cernea, M; Oprea, OC	not available	not available		not available

		<i>MATERIALS SCIENCE, 81, pp.171-180 (2019)</i>					
158.	Capatanii/Parang Mountains: Polovragi Cave-Oltetului Gorge Karst Area	<i>CAVE AND KARST SYSTEMS OF ROMANIA., pp.83-91 (2019)</i>	Ponta, GML; Aldica, GV; Dumitru, R	not available	not available	10.1007/978-3-319-90747-5_12	not available
159.	Mehedinti Mountains: Martel and Lazului Caves	<i>CAVE AND KARST SYSTEMS OF ROMANIA., pp.157-163 (2019)</i>	Ponta, GML; Aldica, GV; Tulucan, T	not available	not available	10.1007/978-3-319-90747-5_19	not available
160.	Spectroscopic Characterisation of Multiferroic Interfaces	<i>SPECTROSCOPY OF COMPLEX OXIDE INTERFACES: PHOTOEMISSION AND RELATED SPECTROSCOPIES, 26, pp.245-281 (2018)</i>	Husanu, MA; Vaz, CAF	not available	not available	10.1007/978-3-319-74989-1_10	not available
161.	ESR Study of Irradiated Polysaccharides ESR investigation of gamma irradiated pectin	<i>4TH INTERNATIONAL SCIENTIFIC CONFERENCE SEA-CONF 2018, 172, 012003 (2018)</i>	Slave, RM; Grecu, MN; Grecu, VV	not available	not available	10.1088/1755-1315/172/1/012003	not available
162.	Influence of Ionizing Radiations on Structural and Antibacterial Properties of Hydroxyapatite-Polydimethylsiloxane Layers	<i>9TH INTERNATIONAL CONFERENCE ON TIMES OF POLYMERS AND COMPOSITES: FROM AEROSPACE TO NANOTECHNOLOGY, 1981, UNSP 020123 (2018)</i>	Groza, A; Iconaru, SL; Petre, CC; Jiga, G; Badea, ML; Prodan, AM; Beuran, M; Chapon, P; Gaianschi, S; Ganciu, M; Verga, N; Trusca, R; Vineticu, N; Predoi, D	not available	not available	10.1063/1.5045985	not available
163.	ZnHAp Thin Films for Medical Applications	<i>9TH INTERNATIONAL CONFERENCE ON TIMES OF POLYMERS AND COMPOSITES: FROM AEROSPACE TO NANOTECHNOLOGY, 1981, UNSP 020122 (2018)</i>	Iconaru, SL; Groza, A; Chapon, P; Gaianschi, S; Petre, CC; Jiga, G; Beuran, M; Prodan, AM; Lupescu, O; Trusca, R; Predoi, D	not available	not available	10.1063/1.5045984	not available
164.	Commercial Hydroxyapatite Powders for Lead Removal from Aqueous Solution	<i>9TH INTERNATIONAL CONFERENCE ON TIMES OF POLYMERS AND COMPOSITES: FROM AEROSPACE TO NANOTECHNOLOGY, 1981, UNSP 020121 (2018)</i>	Negrila, CC; Iconaru, SL; Motelica-Heino, M; Guegan, R; Predoi, G; Barbuceanu, F; Ghita, RV; Petre, CC; Jiga, G; Badea, ML; Prodan, AM; Predoi, D	not available	not available	10.1063/1.5045983	not available
165.	Antimicrobial Studies on Iron Oxide-Dextran Colloidal Suspension	<i>9TH INTERNATIONAL CONFERENCE ON TIMES OF</i>	Predoi, D; Iconaru, SL; Buton, N; Predoi, G;	not available	not available	10.1063/1.5045967	not available

		<i>POLYMERS AND COMPOSITES: FROM AEROSPACE TO NANOTECHNOLOGY, 1981, UNSP 020105 (2018)</i>	Barbuceanu, F; Petre, CC; Jiga, G; Badea, ML; Prodan, AM				
166.	AlN/Si based SAW resonators for very high sensitivity temperature sensors	<i>2018 IEEE INTERNATIONAL ULTRASONICS SYMPOSIUM (IUS),, pp.- (2018)</i>	Nicoloiu, A; Muller, A; Zdru, I; Vasilache, D; Stan, GE; Nastase, C; Dumitru, V; Dinescu, A	not available	not available		not available
167.	Limits and Particularities of the Synthesis of Ba1-xCaxTiO3 for Piezoelectric Applications, by Topochemical Conversion from Molten Salt Solutions	<i>2018 INTERNATIONAL CONFERENCE AND EXPOSITION ON ELECTRICAL AND POWER ENGINEERING (EPE),, pp.1047-1050 (2018)</i>	Vlaicu, ID; Maraloiu, AV; Ghica, D; Mercioniu, IF; Stefan, M; Vlaicu, AM; Negrea, RF; Kuncser, AC; Bulat, S; Krzmanc, MM; Ciobanu, R; Plopa, O	not available	not available		not available
168.	Polymer Dispersed Liquid Crystals films doped with carbon nanotubes - preparation methods	<i>ADVANCED TOPICS IN OPTOELECTRONICS, MICROELECTRONICS, AND NANOTECHNOLOGIES IX, 10977, UNSP 1097702 (2018)</i>	Manaila-Maximean, D; Circu, V; Ganea, P; Barar, A; Danila, O; Staicu, T; Loiko, VA; Konkolovich, AV; Miskevich, AA	not available	not available	10.1117/12.2326186	not available
169.	Impedance spectroscopy and electro-optic switching times of a liquid crystal-hydroxypropylcellulose network composite	<i>ADVANCED TOPICS IN OPTOELECTRONICS, MICROELECTRONICS, AND NANOTECHNOLOGIES IX, 10977, UNSP 109770P (2018)</i>	Maximean, DM; Barar, A; Ganea, CP; Almeida, PL; Danila, O	not available	not available	10.1117/12.2326224	not available
170.	New Lasing Regimes of High-beta Nanolasers	<i>2018 IEEE PHOTONICS SOCIETY SUMMER TOPICAL MEETING SERIES (SUM),, pp.23-24 (2018)</i>	Lohof, F; Barzel, R; Gartner, P; Gies, C	not available	not available		not available

4.2.2. Lucrări/comunicări științifice 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.				
2.				

Nr.	Manifestare științifică	Titlu prezentare	Autori (Nume și prenume)	Tipul
-----	-------------------------	------------------	--------------------------	-------

Crt.	(denumire, perioada, locatie)			prezentarii (invitata, orala, poster)
Participari si prezentari sustinute financiar din proiectul 12PFE/2018, Etapele 2 si 3 din 2019				
1	EMN Epitaxy, Amsterdam June 17-21, 2019, Holland	New functionalities and findings in epitaxial ferroelectric structures	Georgia A. Boni, Lucian D. Filip, Cristina Chirila, Alin Iuga, I. Pasuk, Luminita Hrib, Lucian Trupina, Ioana Pintilie, Lucian Pintilie	Invited
2	Conferinta E-MRS 2019, 26.05-01.06.2019, Nice, Franta	Developing ferroelectric based multilayered thin films structures for new applications	Georgia A. Boni, Lucian D. Filip, Cristina Chirila, Alin Iuga, I. Pasuk, Luminita Hrib, Lucian Trupina, Ioana Pintilie, Lucian Pintilie	Oral
3	Conferinta RomCat 2019, 7-12 iunie 2019, Bucuresti, Romania	Lead photo-reduction from Pb(Zr,Ti)O ₃ (001) investigated by photoelectron spectro-microscopy	Laura E. Abramiuc ^{1,2} , Liviu C. Tănase ¹ , Cristina F. Chirilă ¹ , Alexei Barinov ³ , Cristian M. Teodorescu ¹	Oral
4	SPR summer school, June 6-11, 2019, Tampere, Finland	Surface charge and pH influence on BSA adsorption on Polyelectrolyte layers	Anca Aldea, Dominik Söder, Jari Väliaho	Oral
5	World Congress on Functional Materials and Nanotechnology May 13-14, 2019, Valencia, Spain	Mesoporous TiO ₂ scaffold engineering in hybrid perovskite solar cells	Andrei Gabriel Tomulescu ^{1,2} , Viorica Stancu ¹ , Cristina Beșleagă ¹ , Monica Enculescu ¹ , Mihaela Florea ¹ , Viorel Dumitru ¹ , Lucian Pintilie ¹ , Ioana Pintilie ¹ and Lucia Leonat ¹	Oral
6	Superconductivity meets Molecular Spins, Lisbon, Portugal, 22 March 2019	Ways toward multifunctionality in systems of biomolecules	Bogdana Borca	Oral
7	MECAME-GFSM 2019, 19-23 mai 2019, Franta / Montpellier	Magnetostriction effects in RE-Fe-B ribbons investigated by Mössbauer spectroscopy	C. Locovei, A. Alexandru, G. Schinteie, N. Iacob, A. Stanciu, S.Greculeasa, M. Sofronie, F. Tolea, C. Bartha and V. Kuncser	Poster
8	Conferinta E-MRS 2019, 26.05-01.06.2019, Nice, Franta	Effect of ITO electrode patterning on the properties of MAPLE prepared organic heterostructures based on non-fullerene acceptor	A. Stanculescu, C. Breazu, M. Socol si altii	Poster
9	Conferinta E-MRS 2019, 26.05-01.06.2019, Nice, Franta	Hybrid organic-inorganic heterostructures deposited by MAPLE la sectiunea Laser interaction with materials: from fundamentals to application.	M. Socol, N. Preda, A. Costas, C. Breazu si altii	Poster
10	Conferinta E-MRS 2019, 26.05-01.06.2019, Nice, Franta	Water stable photocatalysts based on zinc oxide and copper oxide core-shell	Camelia FLORICA, 1 Andreea COSTAS, 1* Nicoleta PREDA, 1 Mihaela BEREGOI, 1 Andrei KUNC SER, 1	Poster

		nanowires	Nicoleta APOSTOL, ¹ Cristina POPA, ² Gabriel SOCOL, ² Victor DICULESCU, ¹ and Ionut ENCULESCU ¹	
11	Conferinta E-MRS 2019, 26.05-01.06.2019, Nice, Franta	Studies of the epitaxial PbZr _{0.2} Ti _{0.8} O ₃ thin films capacitor structures deposited on Si substrate	G. A. Boni ¹ , C. Chirila ¹ , L. D. Filip ¹ , A. Iuga ¹ , I. Pasuk ¹ , L. Hrib ¹ , L. Trupina ¹ , A.M. Husanu ¹ , C. Istrate ¹ , Gwenael Le Rhun ² , I. Pintilie ¹ , L. Pintilie ¹	Poster
12	EMN Epitaxy, Amsterdam June 17-21, 2019, Holland	Strain driven defects in epitaxial thin films: HRTEM quantification and nanoscale mapping	Corneliu Ghica, Raluca Negrea, Valentin Teodorescu, Cristina Chirila, Nicu Scarisoreanu, Lucian Pintilie	Invited
13	Conferinta E-MRS 2019, 26.05-01.06.2019, Nice, Franta	About hysteresis, dielectric constant and negative capacitance in PZT capacitors	Lucian Pintilie*, Andra Georgia Boni, Cristina Chirila, Luminita Hrib, Lucian Trupina, Lucian Dragos Filip	Invited
14	Conferinta RomCat 2019, 7-12 iunie 2019, Bucuresti, Romania	Coupling ferroelectric PZT(001) surfaces with noble metals (Ag) for dissociation of adsorbed molecules (CO)	Adela Nicolaev, Nicoleta G. Apostol, Ruxandra M. Costescu, Amelia E. Bocîrne, Ioana A. Hristea, Cristina F. Chirilă, Cristian M. Teodorescu	Oral
15	Conferinta E-MRS 2019, 26.05-01.06.2019, Nice, Franta	ZnO-CuO core-shell radial heterojunction nanowires: synthesis, properties and optoelectronic applications	Andreea COSTAS, Camelia FLORICA, Nicoleta PREDA, Nicoleta APOSTOL, Andrei KUNC SER, Ionut ENCULESCU	Oral
16	World Congress on Functional Materials and Nanotechnology May 13-14, 2019, Valencia, Spain	Properties of electrochemically grown CdTe nanowires	Melania Loredana ONEA ^{1,2} , Elena MATEI ¹ , Monica ENCULESCU ¹ , Ionut ENCULESCU ¹	Oral
17	9th International Conference of the Chemical Societies of the South-East European Countries Valahia University of Targoviste May 8, 2019 – May 11, 2019	La ₂ O ₃ -doped alumina supported cerium–manganese mixed oxides for CH ₄ catalytic combustion	Mihaela M. Trandafir, ^a Ștefan Neațu, ^a Florentina Neațu, ^a Adelina Stănoiu, ^a Ovidiu G. Florea, ^a Cristian E. Simion, ^a Cornel Cobianu, ^b Marin Gheorghe, ^b Lucia N. Leonat, ^a Mihaela Florea ^a	Oral
18	9th Edition of International Conference on Chemistry Science and Technology & 11 th International Conference & Expo on Chromathography Techniques”, Dublin, Irlanda, 21.04-24.04.2019	Indium Tin Oxide Thin Films Deposited by Pulsed Laser Deposition on Nanopatterned Glass Substrates.	C. Breazu	Oral
19	Conferinta RomCat 2019, 7-12 iunie 2019, Bucuresti, Romania	CO adsorption, photodesorption and associated charge transfer on atomically clean graphene synthesized on	Cristina Bucur, Nicoleta G. Apostol, George A. Lungu, Cristian A. Tache, Cristian M. Teodorescu	Oral

		atomically clean Pt(001)		
20	Conferinta RomCat 2019, 7-12 iunie 2019, Bucuresti, Romania	Fast photoelectron spectroscopy follow-up of the efficiency of ferroelectric substrates for CO reduction / oxidation: the case of Pb(Zr,Ti)O ₃ (001) decorated with gold nanoparticles	Nicoleta G. Apostol ¹ , Marius A. Huşanu ¹ , Daniel Lizzit ² , Ioana A. Hristea ^{1,3} , Cristina F. Chirilă ¹ , Lucian Trupină ¹ , Cristian M. Teodorescu ^{1*}	Invited
21	GraFox Summer School, 03-9.06.2019, Italia,Milano	Ge Nanocrystals in TiO ₂ Films for Near Infrared Optical Sensors	Ovidiu Cojocaru, Ioana Dascalescu, Catalin Palade, Adrian Slav National Institute of Materials Physics, Magurele, Romania	Oral
22	GraFOx Summer School (June 3-9, 2019), Centro Italo-Tedesco per l'Eccellenza Europea Villa Vigoni, Loveno di Menaggio (CO), Italia	Graphene-like carbon layers grown on ferroelectric Pb(Zr,Ti)O ₃ (001)	Nicoleta G. Apostol ¹ , Adrian Lungu ¹ , Cristina Dragoi ¹ , Daniel Lizzit ² , Paolo Lacovig ² , Silvano Lizzit ² , Lucian Pintilie ¹ , Cristian M. Teodorescu ¹	Oral
23	GraFox Summer School, 03-9.06.2019, Italia,Milano	Study of crystalline phases by TEM/HRTEM techniques in ferroelectric oxides thin films based on HZO	M. C. Istrate ¹ , C. GHICA ¹ , R. F. Negrea ¹	Poster
24	GraFox Summer School, 03-9.06.2019, Italia,Milano	Microstructural Characterization of Ferroelectric Oxides Thin Films Based on Hafnia	C. Radu ¹ , C.GHICA ¹	Poster
25	GraFox Summer School, 03-9.06.2019, Italia,Milano	Non Volatile Memory Trilayers with Floating Gate of GeSi Nanocrystals in HfO ₂ and SiO ₂	Ioana Lalau ¹ , Catalin Palade ¹ , Ionel Stavarache ¹	Poster
26	GraFox Summer School, 03-9.06.2019, Italia,Milano	Band Alignment in a Ferroelectric Capacitor, Revisited	N. Plugaru	Oral
27	GraFox Summer School, 03-9.06.2019, Italia,Milano	Optoelectronic Properties of Heterojunction ZnO-CuxOCore-Shell Nanowires	Andreea COSTAS,* CameliaFLORICA,NicoletaPREDA, NicoletaAPOSTOL, Andrei KUNC SER, Andrei NIT ESCUand IonutENCULESCU ¹	Poster
28	GraFox Summer School, 03-9.06.2019, Italia,Milano	Properties of CdTe nanowires contacted on a SiO ₂ /Si substrate	MelaniaLoredanaONEA ^{1,2} , Elena MATEI ¹ , Monica ENCULESCU ¹ , IonutENCULESCU ¹	Poster
29	GraFox Summer School, 03-9.06.2019, Italia,Milano	Low Field Dielectric Properties of Sol-Gel Derived Ferroelectric Oxides With Perovskite Structure	Roxana E. Patru ^{1*} , Paul Ganea ¹ , Catalina-Andreea Stanciu ² , Vasile-Adrian Surdu ² , Adelina-Carmen Ianculescu ² , Ioana Pintilie ¹ and Lucian Pintilie ¹	Oral
30	Conferinta SIPS 2019, 23-	Recent results and new	L. Pintilie, A. G. Boni, C. Chirila, L.	Invited

	27 octombrie, Pafos, Cipru	functionalities in ferroelectric based structures	Hrib, L.D. Filip, N. Plugaru, I. Pasuk, L. Trupina, R. Negrea, C. Istrate, L. Balescu, C. Besleaga, G. Stan, I. Pintilie,	
31	35-a Conferinta Internationala asupra Aplicatiilor Efectului Mossbauer, ICAME 2019, 1-6 septembrie, Dalian, China	Mössbauerspectroscopy explaining specific magneto-functionalities in RE-Fe amorphous thin films	V. Kuncser, A.E. Stanciu, A. Kuncser, C. Locovei, G. Schinteie, N. Iacob, N. Plugaru, O. Crisan	Invited
32	F2CP2 Joint Conference, 13-20 iulie 2019, Elvetia / Lausanne	Ferroelectric multilayered thin films structures for new storing and/or computing concepts	Georgia A. Boni, Lucian D. Filip, Cristina Chirila, Alin Iuga, I. Pasuk, Luminita Hrib, Lucian Trupina, Ioana Pintilie, Lucian Pintilie	Oral
33	European Advanced Materials Congress, 11-14 august, Suedia / Stockolm	Organometallics for OLED and OPV: fundamentals and applications	S. Polosan	Invited
34	International Summer School on Nanoscience and Nanotechnologies & International Conference on Nanoscience and Nanotechnologies (ICNN), 28 iun-6 iulie 2019, Grecia / Salonic	Nanoaggregates of impurities in superhard cubic boron nitride crystals	A. C. Joita* ^{1,2} , S. V. Nistor ^{1,2} , L. C. Nistor ¹ , R. F. Negrea ¹	Poster
35	International Summer School on Nanoscience and Nanotechnologies & International Conference on Nanoscience and Nanotechnologies (ICNN), 28 iun-6 iulie 2019, Grecia / Salonic	On the thermal stability of mesoporous metal oxide systems decorated with metallic nanoparticles for gas sensing applications	M. C. Istrate ¹ , V. A. Maraloiu ¹ , C. Radu ¹ , I. D. Vlaicu ¹ , S. Somacescu ² , A. Kuncser ¹ , C. Ghica ¹	Poster
36	ICSON – 2019, 19-21 august, Spania / Barcelona	Optical properties of the polystyrene /graphene oxide composites	M. Stroe ¹ , M. Cristea ¹ , E. Matei ¹ , L. C. Cotet ² , L. Pop ² , L. Baia ³ , M. Baibarac ¹	Poster
37	NANOTECH France – 2019, 26-29.06.2019, Franta/ Paris	Composites based on poly(2, 2'-bithiophene) and TiO ₂ nanoparticles: from chemical synthesis to optical properties and their applications in the leather and textile materials field	I. Smaranda ^{1*} , M. Stroe ¹ , A. Radu ¹ , R. Cercel ¹ , C. Gaidau ² , L. Chirila ² , M. Baibarac ¹	Poster
38	9th International Conference on Amorphous and Nanostructured Chalcogenides- Fundamentals and Applications 30 June –04 July, 2019, Chisinau, Republic of Moldova	Nonvolatile resistance switching in monolayer transition metal dichalcogenides: an explanation	C. Mihai, A. Velea, F. Sava*, A.T. Buruiana	Poster
39	IBWAP 2019, 16-20 iulie	Optical and conductive	M. Daescu ¹ , A. Udrescu ¹ , P. Ganea ¹ ,	Poster

	2019, Constanta, Romania	properties of the composites based on iron oxide and carbon nanotube	I. Mercioniu ¹ , N. Iacob ¹ , V. Kuncser ¹ , M. Baibarac ¹	
40	F2CP2 Joint Conference, 13-20 iulie 2019, Elvetia / Lausanne	Ferroelectric switching dynamic and negative capacitance regimes in epitaxial PbZr _{0.2} Ti _{0.8} O ₃ based thin film capacitor	G. A. Boni ¹ , C. Chirila ¹ , L. D. Filip ¹ , A. Iuga ¹ , I. Pasuk ¹ , L. Hrib ¹ , L. Trupina ¹ , I. Pintilie ¹ , L. Pintilie ¹	Poster
41	F2CP2 Joint Conference, 13-20 iulie 2019, Elvetia / Lausanne	Optimization strategy for Berry phase polarization calculations	Lucian D. Filip, Neculai Plugaru and Lucian Pintilie	Poster
42	International Conference for Physics Students, August 10-17, 2019, Cologne, Germany	Te-based chalcogenide materials for selector applications	A.T. Buruiană ^a , A. Velea ^{a,b} , K. Opsomer ^b , W. Devulder ^b ,	Poster
43	50 th General Assembly & 47 th IUPAC World Chemistry Congress, 5-12 July, Paris, France, 2019	Mn-silica hollow spheres for ethanol transformation	Mihaela M. Trandafir, Ștefan Neațu, Mihaela Florea, Florentina Neațu	Poster
44	International Conference on Magnetism and Magnetic Materials, 19-20 august 2019, Londra, UK	Exchange interactions and associated magnetic and magneto-resistive properties of amorphous Fe-RE (RE = Gd, Dy) thin films	A.E. Stanciu ¹ , G. Schinteie ¹ , A. Kuncser ¹ , N. Iacob ¹ , V. Kuncser ¹	Poster
45	International Conference on Magnetism and Magnetic Materials, 19-20 august 2019, Londra, UK	Structural, magnetic and magneto-transport study of epitaxial LSMO films of different thicknesses deposited on STO	Simona G. Greculeasa ¹ , Aurel Leca ^{1,2} , Andrei Kuncser ¹ , Luminita Hrib ¹ , Iuliana Pasuk ¹ , Victor Kuncser ¹	Oral
Participari la conferinte in 2019 suportate financiar din alte surse, dar care contribuie la realizarea planului de dezvoltare al INCDFM pentru perioada 2018-2020				
1.	The 11 th International Conference on Materials Science and Engineering – BraMat, 13–16 March 2019, Brasov, Romania	Effect of processing parameters on the morphology, surface and mechanical properties of sintered ceramics prepared from fish bone	A. Maidaniuc, M. Miculescu, T.M. Butte, L.M. Boldu, R.C. Ciocoiu, F. Miculescu, G.E. Stan, T. Machedon-Pisu	Orala
2.	The 11 th International Conference on Materials Science and Engineering – BraMat, 13–16 March 2019, Brasov, Romania	Synthesis and characterization of biocompatible polymer-ceramic film structures as favorable interface in guided bone regeneration	C.A. Dascălu, A. Maidaniuc, I.V. Antoniac, F. Miculescu, A.M. Pandele, S.I. Voicu, T. Machedon-Pisu, G.E. Stan, A. Cîmpean, V. Mitran	Orala
3.	The 11 th International Conference on Materials Science and Engineering – BraMat, 13–16 March 2019, Brasov, Romania	Internal and external surface features of newly developed porous ceramics with random, interconnected 3D channels by fibrous sacrificial porogen method	A.C. Mocanu, M. Miculescu, T. Machedon-Pisu, A. Maidaniuc, S.I. Voicu, R.C. Ciocoiu, A.M. Pandele, M Ionita, G.E. Stan, F. Miculescu	Orala

4.	European Materials Research Society (E-MRS) Conference – Spring Meeting, 27–31 May 2019, Nice, France	Synergetic antibacterial effect in alkali free bio glasses incorporated with ZnO and/or SrO as therapeutic agents	A.C. Popa, T. Tite, I.M. Bogdan, H.R. Fernandes, M. Neculescu, C. Luculescu, M. Cioangher, V. Dumitru, B.W. Stuart, D.M. Grant, J.M.F. Ferreira, G.E. Stan	Poster
5.	European Materials Research Society (E-MRS) Conference – Spring Meeting, 27–31 May 2019, Nice, France	Tuning the structure and biological response of sputtered phosphate bioglass films by the deposition pressure	T. Tite, A.C. Popa, A.C. Galca, L.M. Balescu, I.M. Bogdan, B.W. Stuart, G. Pelin-Popescu, G.E. Stan	Poster
6.	European Materials Research Society (E-MRS) Conference – Spring Meeting, 27–31 May 2019, Nice, France	Investigation of morphological, structural changes and biological performance of Zinc or Magnesium substituted hydroxyapatite with dopant concentration	I.M. Bogdan, T. Tite, L.M. Balescu, S. Iconaru, C.S. Ciobanu, D. Predoi, A.C. Popa, L. Albulescu, C. Tanase, S. Nita, G.E. Stan	Poster
7.	European Materials Research Society (E-MRS) Conference – Spring Meeting, 27–31 May 2019, Nice, France	Investigation of morphological, structural and biological performance in Strontium or Cerium substituted hydroxyapatite at low concentration	I.M. Bogdan, T. Tite, L.M. Balescu, A.C. Popa, L. Albulescu, C. Tanase, S. Nita, G.E. Stan	Poster
8.	European Materials Research Society (E-MRS) Conference – Spring Meeting, 27–31 May 2019, Nice, France	Comparative structural and dielectric properties of pure and Li-doped synthetic and bovine bone-derived hydroxyapatite in both bulk and thin film form	T. Tite, I.M. Bogdan, L.M. Balescu, G.E. Stan, I. Pasuk, G. Boni, L. Hrib	Poster
9.	EuroNanoForum, 12–14 June 2019, Bucharest, Romania	Functional performance of bioactive silica-based glass implant coatings deposited by magnetron sputtering onto dental screws	G.E. Stan, A.C. Popa, V.M.F. Marques, A.C. Galca, C. Ghica, M.A. Husanu, M. Enculescu, C. Tanase, D.U. Tulyaganov, J.M.F. Ferreira	Poster
10.	42 nd International Semiconductor Conference CAS 2019, 9–11 October 2019, Sinaia, Romania	Replacing Pb with Sb in Halide Perovskite for Field Effect Thin Film Transistors	C. Besleaga, V. Stancu, C. Ciobotaru, S. Polosan, H. Saidi, G. Stan, L. Pintilie	Poster
11.	Sesiunea anuală a Institutului de Arheologie „Vasile Pârvan” „Metodă, teorie și practică în arheologia contemporană”, 27–29 Martie 2019, Bucuresti, Romania	Caracterizarea fizico-chimică a pigmentilor albi utilizați la decorarea ceramicii din Bronzul târziu din sudul României (aprox. 1550–1350 cal. BC), Studiu preliminar	N. Palincaș, M. Straticiu, D. Mirea, A.M. Vlaicu, G. Stan, M.-M. Manea, C.A. Simion, A. Velea, L. Trache	Orala
12.	6 th Nano Today Conference, 16-20 June 2019, Lisbon, Portugal	Dielectric relaxations studies of ternary nanocomposite of vinyl resin matrix reinforced	L. Kreit, A.C. Galca, A. Zyane, P. Ganea, C. Bartha, G.E. Stan, M. Enculescu, L. Pintilie, M. El Hasnaoui, M.E. Achour, A. Belfkira	Poster

		with carbon nanotubes and microcrystalline celluloses		
13	“19-th International Balkan Workshop on Applied Physics”, 16-19 iulie 2019, Constanta	“Interchangeable metasurfaces for immunofluorescent staining sensor and spectroscopical system”	Costel COTIRLAN-SIMIONIUC, Catalin Constantin NEGRILA, Constantin LOGOFATU	Poster
14	“19-th International Balkan Workshop on Applied Physics”, 16-19 iulie 2019, Constanta	“Metasurfaces with available characteristics for polarization state analyzers, superlens or electro-optical modulators”	Costel COTIRLAN-SIMIONIUC, Catalin Constantin NEGRILA, Constantin LOGOFATU	Poster
15	9th International Conference of the Chemical Societies of the South-East European Countries (ICOSECS9), 08.05.2019-10.05.2019, Târgoviște, România	Hybride organic-inorganic perovskite ($\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{I}_3$) for solar cell applications	F. Neatu, S. Derbali, S. Neatu, A. C. Galca, L. N. Leonat, A. G. Tomulescu, V. Stancu, V. Toma, I. Pintilie, M. Florea	Poster
16	47th IUPAC World Chemistry Congress, 05.07.2019-13.07.2019, Paris, Franta	Synthesis and properties of $\text{C}_3\text{N}_2\text{H}_5\text{PbI}_3$ powders as precursors for hybride perovskite based solar cells	M. Florea, F. Neațu, S. Neațu, S. Derbali, A. C. Galca, V. Toma, C. Bartha, L. N. Leonat, A.G. Tomulescu, V. Stancu, I. Pintilie	Poster
17	3rd Edition of International Congress on Catalysis and Chemical Science, 24.02.2019-26.02.2019, Singapore, Singapore	Recent development of Ni based composite as electrocatalysts for proton exchange membrane fuel cells	F. Neațu, M. M. Trandafir, S. Neațu, S. Somacescu, M. Florea	Prezentare orală
18	3rd Edition of International Congress on Catalysis and Chemical Science, 24.02.2019-26.02.2019, Singapore, Singapore	Europium-doped $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{Pb}_{1-x}\text{Eu}_x\text{I}_3$ for perovskite based solar cell application	S. Derbali, F. Neatu, S. Neatu, A. C. Galca, L. N. Leonat, A. G. Tomulescu, V. Stancu, V. Toma, I. Pintilie, M. Florea	Prezentare orală
19	4th edition of the INTERNATIONAL WORKSHOP OF MATERIALS PHYSICS	Cost efficient oxygen generation through alkaline water electrolysis using Ni on SnO_2 mesoporous support-based electrocatalysts	S. Neatu, F. Neatu, V. C. Diculescu, M. M. Trandafir, N. Petrea, S. Somacescu, M. Florea	Prezentare orală
20	4th edition of the INTERNATIONAL WORKSHOP OF MATERIALS PHYSICS	Photoelectron spectromicroscopy: revealing the stability of ferroelectric surfaces with respect to irradiation and contamination	L. E. Abramiuc, D. G. Popescu, M. A. Husanu, L. C. Tanase, N. G. Apostol, C. A. Tache, I. C. Bucur, A. Barinov, J. Avila, C. F. Chirila, L. Trupina, C. M. Teodorescu	Prezentare orală
21	4th edition of the INTERNATIONAL WORKSHOP OF MATERIALS PHYSICS	Carbon monoxide adsorption, dissociation and oxidation on ferroelectric surfaces decorated with	A. Nicolaev, M. A. Husanu, N. G. Apostol, R. M. Costescu, A. E. Bocirnea, I. A. Hristea, D. Lizzit, C. F. Chirila, L. Trupina, C. M. Teodorescu	Prezentare orală

		nanoparticles of noble metals		
22	4th edition of the INTERNATIONAL WORKSHOP OF MATERIALS PHYSICS	The use of three-component composites in the photocatalytic water splitting reaction	S. Neatu, F. Neatu, M. Florea, L. E. Abramiuc, C.M. Teodorescu	Prezentare orala
23	IEEE International Semiconductor Conference – IEEE CAS, 9-11 octombrie 2019, Sinaia	Controlling SWIR photosensitivity limit by composition engineering: from Ge o GeSi nanocrystals embedded in TiO ₂	I. Dascalescu, O. Cojocaru, I. Lalau, C. Palade, A. Slav, A. M. Lepadatu, S. Lazanu, T. Stoica, M. L. Ciurea	orala
24	IEEE International Semiconductor Conference – IEEE CAS, 9-11 octombrie 2019, Sinaia	High performance NIR photosensitive films of Ge nanoparticles in Si ₃ N ₄	I. Stavarache, P. Prepelita, I. Lalau, O. Cojocaru, V. S. Teodorescu, M. L. Ciurea	poster
25	19 th International Balkan Workshop on Applied Physics – IBWAP, 16-19 iulie 2019, Constanta	Advances in Ge nanocrystals-based structures for SWIR sensors and non-volatile memories	C. Palade, A. Slav, A. M. Lepadatu, I. Stavarache, I. Dascalescu, O. Cojocaru, I. Lalau, S. Lazanu, C. Logofatu, T. Stoica, V. S. Teodorescu, M. L. Ciurea	invitata
26	19 th International Balkan Workshop on Applied Physics – IBWAP, 16-19 iulie 2019, Constanta	Extension of short-wave infrared detection by Sn alloying of Ge nanocrystals	I. Dascalescu, A. Slav, C. Palade, C. Logofatu, A. M. Lepadatu, F. Comanescu, S. Iftimie, S. Lazanu, V. S. Teodorescu, M. L. Ciurea, M. Braic, T. Stoica	orala
27	3rd International Conference on Applied Surface Science – ICASS, 17-20 iunie 2019, Pisa, Italia	Germanium nanocrystals embedded in oxide matrix for new memories devices applications	M. L. Ciurea, I. Stavarache, A. Slav, C. Palade, A.-M. Lepadatu, I. Dascalescu, I. Lalau, O. Cojocaru, V. S. Teodorescu, A. V. Maraloiu, S. Lazanu, T. Stoica	poster
28	EuroNanoForum 2019 (NANOTECHNOLOGY AND ADVANCED MATERIALS PROGRESS UNDER HORIZON2020 AND BEYOND), 12-14 iunie 2019, Bucuresti	New advanced materials based on SiGeSn nanocrystals in oxides for SWIR photodetectors and non-volatile memory devices	C. Palade, I. Stavarache, A. M. Lepadatu, A. Slav, S. Lazanu, T. Stoica, V. S. Teodorescu, M. L. Ciurea, F. Comanescu, A. Dinescu, R. Muller, G. Stan, A. Enuica, M. T. Sultan, A. Manolescu, H. G. Svavarsson	poster
29	E-MRS 2019 Spring Meeting, 27-31 mai 2019, Nisa, Franta	GeSnSiO ₂ layers with embedded GeSn nanocrystals for sensing in SWIR	A. Slav, C. Palade, C. Logofatu, I. Dascalescu, A. M. Lepadatu, I. Stavarache, S. Iftimie, V. Braic, S. Antohe, S. Lazanu, V. S. Teodorescu, D. Buca, M. L. Ciurea, T. Stoica, M. Braic	orala
30	E-MRS 2019 Spring Meeting, 27-31 mai 2019, Nisa, Franta	Ge nanocrystals in TiO ₂ with enhanced spectral photosensitivity by photo-effects in semiconductor substrate	I. Dascalescu, A.-M. Lepadatu, A. Slav, C. Palade, O. Cojocaru, I. Lalau, M. Enculescu, S. Iftimie, S. Lazanu, V. S. Teodorescu, T. Stoica, M. L. Ciurea	Poster
31	BES2019 – XXV International Symposium on Bioelectrochemistry and Bioenergetics, 26-30 Mai, Limerick, Irlanda	Magnetic Electrodes and Nanoparticles for Direct Immobilization of Biomolecules through Magnetic Forces	Victor Diculescu, Madalina Barsan, Monica Enculescu, George Stan, Nicoleta Preda, Nicoleta Apostol, Ruxandra Costescu	oral

32	ISE2019 – 70th Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry, 4-9 August, Durban, Africa de Sud	Antibody-based Electrochemical Biosensors for 20S Proteasome	Victor Diculescu, Madalina Barsan	oral
33	70th Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry (conferinta) Perioada: 2-11 august 2019 Locatia: Durban, Africa de Sud	Synthesis and Properties of CdTe nanowires fabricated electrochemically via template method	Melania Loredana ONEA, Elena MATEI, Monica ENCULESCU, Ionut ENCULESCU	Poster
34	Conference of the Romanian Electron Microscopy Society (conferinta) Perioada: 23-25 octombrie 2019 Locatia: Poiana Brasov, Romania	Integration of electrochemically fabricated CdTe nanowires in functional devices using electron beam lithography	Melania Loredana ONEA, Elena MATEI, Monica ENCULESCU, Ionut ENCULESCU	poster
35	70th Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry, 4-9 august 2019, Durban, Africa de Sud	Influence of electrodeposition parameters and electrochemical bath composition on the electrical properties of multichannel ZnO nanowire field effect transistors	Elena Matei, Enculescu Monica, Victor Diculescu, Andreea Costas, Melania Onea, Ionut Enculescu	Poster
36	19th International Balkan Workshop on Applied Physics and Materials Science, 16–19.07.2019, Constanta, Romania	Effect of Additives on the Properties of Electrodeposited CZTS Thin Films	M.Y. Zaki, K. Nouneh, M. Ebn Touhami, A.C. Galca, M. Enculescu, M. Baibarac, L. Pintilie	orala
37	19th International Balkan Workshop on Applied Physics and Materials Science, 16–19.07.2019, Constanta, Romania	Terahertz Characterization of (Ba,Sr)TiO ₃ Ferroelectric Films Grown By PLD And RF Magnetron Sputtering	L. Nedelcu, C. Chirila, G.E. Stan, A.C. Galca, L. Hrib, L. Trupina, C.D. Geambasu, M.G. Banciu	poster
38	19th International Balkan Workshop on Applied Physics and Materials Science, 16–19.07.2019, Constanta, Romania	Effect of Europium Substitution on the Structural and Optical Properties of CH ₃ NH ₃ PbI ₃ Perovskite Films	S. Derbali, M. Florea, A.C. Galca, F. Neatu, S. Neatu, L.N. Leonat, M. Secu, A.G. Tomulescu, V. Stancu, K. Nouneh, L. Pintilie	poster
39	9th International Conference on Amorphous and Nanostructured Chalcogenides (ANC9), 30.06.-4.07.2019, Chisinau, Republic of Moldova	Optical properties of binary and ternary chalcogenides	A.C. Galca, F. Sava, I.D. Simandan, G. Socol, A. Velea	oral
40	9th International Conference on Amorphous and Nanostructured Chalcogenides (ANC9), 30.06.-4.07.2019, Chisinau, Republic of Moldova	Comparative study between CZTS _{1-x} Sex and ABX ₃ based solar cells	S. Derbali, K. Nouneh, A.C. Galca, M. Florea, F. Neatu, A.G. Tomulescu, L.N. Leonat, M. Secu, V. Stancu, L. Pintilie	poster

41	9th International Conference on Amorphous and Nanostructured Chalcogenides (ANC9), 30.06.-4.07.2019, Chisinau, Republic of Moldova	Characterization of CZTS thin films obtained by magnetron co-deposition from binary sputtering targets	O. Diagne, A.C. Galca, F. Sava, I.D. Simandan, A. Velea	poster
42	9th International Conference on Amorphous and Nanostructured Chalcogenides (ANC9), 30.06.-4.07.2019, Chisinau, Republic of Moldova	Study of Electrodeposited Cu ₂ ZnSnS ₄ Thin Film Properties by a Modified Sulfurization Process	S. Azmi, E.M. Khoumri, M. Nohair, A.C. Galca, M. Dabala	poster
43	9th International Conference on Amorphous and Nanostructured Chalcogenides (ANC9), 30.06.-4.07.2019, Chisinau, Republic of Moldova	Enhancing the stoichiometry of sequentially electrodeposited CZTS thin films	M.Y. Zaki, K. Nouneh, M. Ebn Touhami, A.C. Galca, E. Matei, L. Pintilie	poster
44	9th International Conference on Amorphous and Nanostructured Chalcogenides (ANC9), 30.06.-4.07.2019, Chisinau, Republic of Moldova	Structural and optical properties of amorphous GeTe films	I.D. Simandan, A.C. Galca, F. Sava, C. Bucur, V. Dumitru, C. Porosnicu, C. Mihai, A. Velea	poster
45	12th European Congress of Chemical Engineering (ECCE12), 15.-19.09.2019, Florence, Italy	Synthesis, electronic polarizability and optical basicity of a novel zinc phospho-tellurite glass	L. Boroica, B.A. Sava, M. Elisa, R.C. Stefan, I.C. Vasiliu, S.M. Iordache, A.C. Galca, V. Kuncser	poster
46	European Congress and Exhibition on Advanced Materials and Processes (EUROMAT 2019), 1.-5.09.2019, Stockholm, Sweden	Novel magnetic field sensor based on zinc phospho-tellurite glass for Faraday rotators	M. Elisa, C.R. Stefan, I.C. Vasiliu, S.M. Iordache, B.A. Sava, L. Boroica, A.C. Galca, V. Kuncser	poster
47	XXV International Symposium on Bioelectrochemistry and Bioenergetics (BES 2019); 26-31 Mai 2019; Limerick, Irlanda	Redox Mechanisms of Proteasome Inhibitors	Teodor Adrian Enache, Victor Constantin Diculescu	poster
48	70th Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry (ISE); 4-9 August 2019; Durban, Africa de Sud	Redox Mechanism of Azathioprine and its Interaction with DNA	TA. Enache, M. Enculescu and VC. Diculescu	oral
49	70th Annual Meeting of International Society of Electrochemistry, South Africa, Durban, 4-9 August	Polyhydrazide Architectures for (bio)Sensing Applications	Daniel N Crisan, Teodor A Enache, Victor C Diculescu	poster
50	19th International Balkan Workshop on Applied Physics and Materials Science, 16-19.07.2019, Constanta, Romania	Coloring and dielectric properties of phosphotellurite glasses	Silviu Polosan, Andrei Nistescu, Mihai Secu	invitata
51	IUPAC Chemistry Congress	Surface studies on the	Lucia Leonat	poster

	(IUPAC 2019)	PEDOT:PSS films modified with Triton-X 100 surfactant		
52	9th International Balkan Workshop on Applied Physics and Materials Science”, Constanta, Romania, 16 - 20 July 2019	Structural, ferroelectric and cytotoxic properties of barium titanate-hydroxyapatite composite ceramics	Luminita AMARANDE, George STAN, Corneliu Florin MICLEA, Marius CIOANGHER, Lucian TRUPINA, Iuliana PASUK, Elena MATEI, Tudor SAVOPOL, Mihaela Georgeta MOISESCU, Luminita Claudia MICLEA	poster
53	The 7th International Workshop on Far-Infrared Technologies 2019 (IW-FIRT 2019), 5-7 March 2019	Investigation s on some dielectric materials in sub-Terahertz and Terahertz beams	Banciu Marian Gabriel, Furuya Takashi, HribLuminita, NedelcuLiviu, Trupina Lucian, Pantelica Dan, Mihai M. Dana, Tani Masahiko	Poster
54	EMRS 2019 Spring Meeting, 27 – 31 May 2019, Nice, France	Terahertz and optical properties of Ba _{0.6} Sr _{0.4} TiO ₃ thick films grown by PLD	Nedelcu L., Annino G., Chirila C., Trupina L., Galca A.C., BanciuM. G.	Poster
55	EMRS 2019 Spring Meeting, 27 – 31 May 2019, Nice, France	Dielectric properties of BNT-BT ferroelectric thin films in microwave and millimeter waves	Stancu V., Trupina L., Nedelcu L., Mihalache V., Banciu M. G., Huitema L., Ghalem A., Crunteanu A., Contantinescu C., Dumas-Bouchiat F., Champeaux C.	Poster
56	20th International Balkan Workshop on Applied Physics and Materials Science, 14-17 July 2020, Constanta, Romania	Terahertz characterization of (Ba,Sr)TiO ₃ ferroelectric films grown by PLD and RF magnetron sputtering	Nedelcu L., Chirila C., Stan G., Galca A.C., Hrib L., Trupina L., GeambasuC. D.,Banciu M. G.	Poster
57	EMN Rome Meeting 2019, 13-17 May 2019 Rome, Italy	Antibacterial cerium doped hydroxyapatite nanopowders for biomedical applications	D. Predoi, S.L. Iconaru, A.M. Prodan, M. Matei, M. Beuran, C.M. Chifiriuc, R.V.Ghita	Poster
58	5thInternational Conference on Mechanics of Composites (MECHCOMP5), Lisbon, Portugal 1-4 July 2019	Biological properties of iron oxide-hydroxyapatite biocomposites	Alina Mihaela Prodan, Simona Liliana Iconaru, Mihai Valentin Predoi, Mikael Motelica-Heino, Regis Guegan, Olivera Lupescu, Mihai Matei, Daniela Predoi	Poster
59	5thInternational Conference on Mechanics of Composites (MECHCOMP5), Lisbon, Portugal 1-4 July 2019	Biological studies of zinc doped hydroxyapatite synthesized at low concentrations	Alina Mihaela Prodan, Simona Liliana Iconaru, Mihai Valentin Predoi, Nicolas Buton, Mircea Beuran, Olivera Lupescu, Adrian Costescu, Nicoleta Vineticu, Daniela Predoi	Poster
60	2nd Edition of CERIC Satellite Event at the NESY Winterschool & Symposium 2019, 4-8 martie 2019, Altaussee, Austria	Seeing with electrons - Introduction to electron microscopy	Ghica Corneliu	Prezentare invitata
61	6th International Congress on Microscopy and Spectroscopy (INTERM), May 12-18 mai 2019, Istanbul, Turcia.	Electron microscopy: a useful tool for the characterization of novel nanostructures with new architectures	Bogdan S. Vasile, Otilia R. Vasile, Roxana Trusca, Marin Cernea	Poster
62	5th Conference of the Serbian Society for Ceramic Materials: 5CSCS-2019, 11-13 iunie 2019, Belgrad, Serbia.	Microstructure control in multiferroic composites	Carmen Galassi, Pietro Galizia, Marin Cernea, Elisa Mercadelli, Claudio Capiani, Floriana Craciun,	Prezentare orala

63	13th International Summer School on Nanosciences and Nanotechnologies, Organic Electronics and Nanomedicine, 29 Iunie – 6 Iulie 2019, Salonic, Grecia	Complex morpho-structural characterization of mezoporous metal oxide systems for chemo-resistive gas sensors	Cătălina Mihalcea, Andrei Kuncser, Ionel Mercioniu, Aurel Mihai Vlaicu, Simona Somăcescu, Corneliu Ghica	Poster
64	16th International Conference on Nanosciences & Nanotechnologies, (NN), perioada 2- 5 Iulie 2019, Thessaloniki, Grecia	Origin of the collective magnetism in cubic ZnS quantum dots doped with Mn ²⁺ ions. From myths to the harsh reality.	Sergiu V. Nistor	Prezentare invitata
65	16th International Conference on Nanosciences & Nanotechnologies, (NN), perioada 2- 5 Iulie 2019, Thessaloniki, Grecia	Nanostructured impurities in superhard crystalline cubic boron nitride	Leona C. Nistor, Sergiu V. Nistor, Alexandra C. Joita	Poster
66	3-rd Conference of the Romanian Electron Microscopy Society, 23-25 octombrie 2019, Poiana Brasov, Romania	Atomic-resolution structural and analytical characterization of layered precipitates in special alloys for high-temperature applications	Ghica Corneliu, Solís Cecilia, Munke Johannes, Stark Andreas, Gehrman Bernd, Bergner Marie, Rösler Joachim, Gilles Ralph	Prezentare orala
67	3rd Conference of the Romanian Electron Microscopy Society, 23 – 25 octombrie 2019, Poiana Braşov, România	Nanometric morpho-structural characterization of mesoporous metal oxide semiconductors for chemo-resistive gas sensors	Cătălina Mihalcea, Andrei Kuncser, Ionel Mercioniu, Aurel Mihai Vlaicu, Simona Somăcescu, Corneliu Ghica	Poster
68	3rd Conference of the Romanian Electron Microscopy Society, October 23-25 Octombrie 2019, Poiana Braşov, România.	SEM investigations of Fe-doped ZnO powders	Roxana Trusca, Marian Cernea, Monica Enculescu, Adrian-Ionut Nicoara, Traian Popescu, Corneliu Trisca-Rusu	Poster
69	3rd Conference of the Romanian Electron Microscopy Society, 23-25 octombrie 2019, Poiana Brasov, Romania	Analytical HRTEM/STEM study of impurity defects in cubic boron nitride crystals	Leona C. Nistor	Prezentare orala
70	3rd Conference of the Romanian Electron Microscopy Society, 23-25 octombrie 2019, Poiana Brasov, Romania	Atomic impurity defects in crystalline cubic boron nitride semiconductor	Sergiu V. Nistor, Leona C. Nistor, Alexandra C. Joita	Poster
71	3rd Conference of the Romanian Electron Microscopy Society, 23-25 octombrie 2019, Poiana Brasov, Romania	Tailoring the Dopant Distribution in ZnO:Mn Nanocrystals	Daniela Ghica, Ioana D. Vlaicu, Mariana Stefan, Valentin A. Maraloiu, Alexandra C. Joita, Corneliu Ghica	Poster
72	3rd Conference of the Romanian Electron	Pd cluster organization in nanostructured SnO ₂	Andrei C. Kuncser, Ioana D. Vlaicu, Corneliu Ghica, Simona Somacescu,	Prezentare orala

	Microscopy Society, 23-25 octombrie 2019, Poiana Brasov, Romania		Cristian Radu	
73	3rd Conference of the Romanian Electron Microscopy Society, 23-25 octombrie 2019, Poiana Brasov, Romania	Microstructural Characterization of Ferroelectric Oxides Thin Films Based on Hafnia	Cristian Radu, Corneliu Ghica	Poster
74	University of Bucharest, Faculty of Physics, Annual Scientific Conference 2019, Bucharest, Romania June 21-22	Effect of Mn substitution on the structural, magnetic and magnetostrictive properties of Fe-Pd ferromagnetic shape memory alloy prepared as ribbons	M. Sofronie, F. Tolea, M. Enculescu, A.D. Crisan	orala
75	University of Bucharest, Faculty of Physics, Annual Scientific Conference 2019, Bucharest, Romania June 21-22	Interplay of magnetostrictive and magneto-transport properties of Fe-Dy ribbons	C. Locovei, A.E. Stanciu, G.Schinteie, N.Iacob, A.Leca, M.Sofronie, V. Kuncser	orala
76	University of Bucharest, Faculty of Physics, Annual Scientific Conference 2019, Bucharest, Romania June 21-22	Physical characterization of Dy and Cu co-doped ZnO thin films grown by radio-frequency magnetron sputtering	Claudiu LOCOVEI, Diana COMAN, Adrian RADU, Lucian ION, Vlad A. ANTOHE, Nicoleta VASILE, Marilena COLT, Marina MANICA, Anca DUMITRU, Sorina IFTIMIE, Stefan ANTOHE	orala
77	Magnetic nanoparticles and their applications in medicine, 4-5 aprilie 2019, Belgrad, Serbia	Engineering and optimization of specific absorption rates of Fe oxides nanoparticles in magnetic hyperthermia	V.Kuncser, N.Iacob, A.Kuncser, P.Palade, C.Comanescu, R.Turcu, G.Schinteie	Lectie invitata
78	5th Mediterranean Conference on the Applications of the Mossbauer Effect MECAME-GFSM 2019, 19-23 Mai 2019, Montpellier, Franta	Mossbauer Spectroscopy-a powerful tool in explaining particularities of Specific Absorption Rates of Fe oxide nanoparticles in magnetic hyperthermia	V.Kuncser, N.Iacob, P.Palade, C.Comanescu, A.Kuncser, G.Schinteie	Lectie invitata
79	International Conference on the Applications of the Mossbauer Effect, ICAME 2019, 01-06 Septembrie 2019, Dalian, China	Mossbauer Spectroscopy Explaining Specific Magneto-functionalities in RE-Fe Amorphous Thin Films	V.Kuncser, A.E.Stanciu, A.Kuncser, C.Locovei, G.Schinteie, N.Iacob, N.Plugaru, O.Crisan	orala
80	Network of the Hungarian Mossbauer Laboratories	On the capability of Mossbauer Spectroscopy to reveal various magneto-functionalities in layered nanosized systems	V.Kuncser	Lectie Invitata
81	ECCE12, The 12th EUROPEAN CONGRESS OF CHEMICAL	Synthesis, electronic polarizability and optical basicity of a	L. Boroica, B. A. Sava, M. Elisa, R.C. Stefan, I. C. Vasiliu, S. M. Iordache, A. C. Galca, V. Kuncser	poster

	ENGINEERING, 15-19 Septembrie 2019, Florenta, Italia	novel zinc phospho-tellurite glass,		
82	21st Romanian International Conference on Chemistry and Chemical Engineering (RICCCE), 4-7 September 2019, Mamaia, România	CORRELATION of HYPERTHERMIA and MAGNETIC MEASUREMENTS in NANOSIZED COBALT FERRITE SYSTEMS	Cezar Comanescu, Nicusor Iacob, Petru Palade, Victor Kuncser	orala
83	“4th edition of the International Workshop of Materials Physics (IWMP)”, 28-29 mai 2019, Magurele, Romania	Thermoelectric nano-composite from double filled skutterudite and carbides	B. Popescu, M. Galatanu, A. D. Crisan, C. Bartha, M. Enculescu, A. Galatanu	orala
84	“4th edition of the International Workshop of Materials Physics (IWMP)”, 28-29 mai 2019, Magurele, Romania	Development of thermal barriers materials with application in energy	M. Galatanu, B. Popescu, M. Enculescu, A. Galatanu	orala
85	“19th International Balkan Workshop on Applied Physics and Materials Science”, 15-20 iulie 2019, Constanta, Romania	Improved W-monoblock with embedded functionally graded thermal barriers for the DEMO divertor	M. Galatanu, B. Popescu, M. Enculescu, A. Galatanu	orala
86	“19th International Balkan Workshop on Applied Physics and Materials Science”, 15-20 iulie 2019, Constanta, Romania	Development of W-W laminates: fighting against W brittleness	A. Galatanu, M. Galatanu, M. Enculescu, J. Reiser	Orala
87	“19th International Balkan Workshop on Applied Physics and Materials Science”, 15-20 iulie 2019, Constanta, Romania	FAST-based route to produce improved DEMO divertor monoblocks	M. Galatanu, G. Ruiu, M. Cioca, A. Ighigeanu, M. Enculescu, A. Galatanu	Poster
88	14th International Symposium on Fusion Nuclear Technology, 22-27.septembrie 2019, Budapesta, Ungaria	W2C-Reinforced Tungsten: A Promising Candidate for High-Heat-Flux Material	P. Jenuš, M. Kocen, A. Abram, A.S. Zavašnik, A. Galatanu, E. Tejado, J.Y. Pastor, M. Wirtz, G. Pintsuk, S. Novak	poster
89	“The Nineteenth International Conference on Fusion Reactor Materials (ICFRM-19)”, 27 octombrie - 1 noiembrie 2019 La Jolla, California, SUA	W-W laminates processed by FAST	M, Galatanu, M. Enculescu, A. Galatanu, J. Reiser	poster
90	“The Nineteenth International Conference on Fusion Reactor Materials (ICFRM-19)”, 27 octombrie - 1 noiembrie 2019 La Jolla, California, SUA	WC as reinforcement for tungsten or matrix material for DEMO divertor	S. Novak, P. Jenuš, M. Kocen, A. Abram, A. Šestan Zavašnik, S. Markelj, M. Kelemen, A. Galatanu, E. Tejado, J.Y. Pastor, G. Pintsuk	poster
91	20th International Union of Materials Research Societies International Conference in Asia (IUMRS-ICA 2019), 22-26 Sept 2019, Perth Australia	Development of MgB ₂ -based composites for superconducting applications	P. Badica	invitata
92	VI International Conference of Technical Chemistry from	MgB ₂ -based materials for different	P. Badica	invitata

	Theory to Praxis, 21-23 May 2019, Perm, Russia	applications		
93	Electron correlation in superconductors and nanostructures (ECSN 2019), 06-10 Oct 2019, Odessa, Ukraine	State of the art in development of Spark Plasma Sintered MgB ₂ superconductor	P. Badica	invitata
94	14th European Conference on Applied Superconductivity (EUCAS 2019), 1-5 Sept 2019, Glasgow, UK	Magnetic shielding by machinable MgB ₂ and superimposed MgB ₂ /Fe bulks	L. Gozzelino, R. Gerbaldo, G. Ghigo, F. Laviano, D Torsello, V. Bonino, M. Truccato, M. Burdusel, M.A. Grigoroșcuta, D. Batalu, G. Aldica, P. Badica	poster
95	14th European Conference on Applied Superconductivity (EUCAS 2019), 1-5 Sept 2019, Glasgow, UK	Microwave investigation of pinning and flux-flow in Te- and cubic-BN- added MgB ₂	A. Alimenti, K. Torokhtii, M. Grigoroșcuta, P. Badica, A. Crisan, E Silva, N. Pompeo	poster
96	The 10th Pacific Rim International Conference on Advanced Materials and Processing (PRICM 10) 18-22 Aug 2019, Xi'an, China	New composites for additive manufacturing	D. Batalu, A. Bunesco, P. Badica, Z. Xiang, W. Lu	oral
97	5th Central and Eastern European Conference on Thermal Analysis and Calorimetry & 14-th Mediterranean Conference on Calorimetry and Thermal Analysis, 27-30 Aug 2019, Roma, Italy	Thermal analysis on Ga or In acetylacetonate powders	G.V Aldica, D. Batalu, P. Badica	poster
98	2nd European ONE HEALTH Conference, 21-22 Iunie 2019, Bucuresti, Romania	MgB ₂ based materials for the improvement of life quality	P. BADICA, M. BURDUSEL, MA GRIGOROSCUTA, G ALDICA, DN Batalu, M Bucur, C Chifiriuc	oral
99	International Workshop of Materials Physics 4th edition, 28-29 Mai 2019, Magurele, Romania	Improved performance of a Si-solar cell by up-conversion in Yb/Er doped CeO ₂ thin films	MA Grigoroșcuta, M. Secu, L. Trupina, M. Enculescu, C. Besleaga, I. Pintilie, P. Badica	oral
100	11th International Workshop on Processing and Applications of Superconducting Bulk Materials (PASREG 2019) August 29 - 30, Prague, Czech Republic	Passive magnetic shielding by machinable MgB ₂ bulks and its modulation by Fe shield addition	L. Gozzelino, R. Gerbaldo, G. Ghigo, F. Laviano, D. Torsello, V. Bonino, M. Truccato, D. Batalu, M. A. Grigoroșcuta, M. Burdusel, G. V. Aldica, P. Badica	oral
101	Materials Research Meeting (MRM 2019), 10-14 Dec 2019, Yokohama, Japonia	Superconducting Thin Films of Bi ₂ Sr ₂ CaCu ₂ O _{8+δ} for Future THz Planar Devices	K. Endo, S. Arisawa, P. Badica	poster
102	Materials Research Meeting, 10-14 Dec 2019, Yokohama, Japonia	Development of MgB ₂ -based materials towards different superconducting applications	P. Badica	invited
103	15th International Workshop on Magnetism & Superconductivity at	"Influence of the structural vortex-phase transition on the second	Lucica Miu, Adrian Crisan	invited

	Nanoscale, 30 iunie - 6 iulie 2019, Coma-Ruga, Spania	magnetization peak in BaFe ₂ (As _{1-x} P _x) ₂ single crystals”		
104	The 5-th Central Eastern European Conference on Thermal Analysis and Calorimetry & 14-th Mediterranean Conference on Thermal Analysis and Calorimetry (CEEC-TAC5 & MEDICTA2019), 27 – 30 august 2019, Roma, Italia.	Thermal analysis of Ga and In acetylacetonate powders	Aldica Gheorghe Virgil	poster
105	COST Workshop on Nanoscale Imaging of quantum devices, 17-20 Februarie, Eilat, Israel	Dynamic Liquid-like Vortex Phase and Pinning Potential in Bi:2212 Films in Low Magnetic Fields Probed by Scanning Hall Probe Microscopy	A. Crisan, S. Bending	invitata
106	AI 17-lea International Workshop on Vortex Matter in Superconductors, 19-26 Mai, Antwerpen, Belgia	Vortices in YBCO thin films with complex pinning structure investigated by AC susceptibility measurements	Adrian Crisan, Ion Ivan, Lucica Miu	poster
107	Conferinta Internationala Superstripes 2019, 22-30 iunie, Ischia, Italia	Disappearance of the second magnetization peak in La _{2-x} Sr _x CuO ₄ single crystals in the presence of static stripe order	Adrian Crisan, Alina Ionescu, Lucica Miu	invitata
108	AI 15-lea International Workshop on Magnetism and Superconductivity at nanoscale, 30 Iunie-6 Iulie, Coma-Ruga, Spania	Models of current-dependent pinning potential in nanostructured YBa ₂ Cu ₃ O ₇ superconducting films	Adrian Crisan, Ion Ivan, Lucica Miu	invitata
109	Conferinta Internationala IUMRS-ICA2019 (International Union of Materials Research Societies – International Conference in Asia), 20-28 Septembrie, Perth, Australia	Vortex matter and dynamics in YBa ₂ Cu ₃ O ₇ superconducting films with correlated and synergetic pinning centres	Adrian Crisan, Ion Ivan, Lucica Miu	invitata
110	Conferinta Internationala “Electron Correlations in Superconductors and Nanostructures, 6-11 Octombrie 2019, Odessa, Ucraina	AC susceptibility, DC magnetization and magnetic relaxation studies of YBa ₂ Cu ₃ O ₇ films with synergetic pinning centres grown by PLD	Adrian Crisan, Ion Ivan, Lucica Miu	invitata
111	International Conference on Condensed Matter and Materials Science, 13-20 Octombrie, Adana, Turcia	Multi-harmonic Susceptibility Response and Steep Vortex Melting Line in Iron-based Superconducting Single Crystal	Adrian Crisan, Lucica Miu	invitata

		CaKFe4As4		
112	11th European Exhibition of Creativity and Innovation EUROINVENT, Iasi, Romania 16-18 Mai 2019	Powders sintered bodies and MgB2 coatings resistant to microbial colonization and microbial biofilm efficacy and method of its use	P Badica, D. Batalu, M Grigoroscuta, M Burdusel, G Aldica, M Popa, M Chifiriuc	poster
113	17th International Exhibition of Research, Innovation and inventions PROINVENT, Cluj Napoca, Romania, 20-22 martie 2019	Pulberi, corpuri sinterizate si acoperiri pe baza de MgB2 rezistente la colonizarea microbiana si cu eficienta impotriva biofilmelor microbiene si metoda de folosire a acestuia	P Badica, D Batalu, M. Grigoroscuta, M. Burdusel, Gh. Aldica, M. Popa, M. Chifiriuc	poster
114	5th International Conference on Applications of Mossbauer Effect ICAME 2019, 1 – 6/09/2019, Dalian, China	STRUCTURE AND MAGNETISM OF L10 NANOCOMPOSITE FE-MN-PT THIN FILMS	O. Crisan	poster
115	22nd International Conference on Composite Materials ICCM22, 12 – 16/08/2019, Melbourne, Australia	RE-FREE EXCHANGE COUPLED NANOCOMPOSITE MAGNETS	O. Crisan	orala
116	10th International Conference on Materials for Advanced Technologies ICMAT2019, 24 – 28/06/2019, Singapore	Novel RE-free L10 phase Nanocomposite Magnets in Magnetic and Spintronic Materials and Devices	O. Crisan	poster

4.2.3. Lucrări publicate în alte publicații relevante:

Nr.	Titlul articolului	Numele Jurnalului, Volumul, Pagina nr.	Nume Autor	Anul publicării
1.				
2.				

Nr. Crt .	Tipul publicatiei (carte, capitol de carte, articol in jurnal BDI, articol in volum de conferinta)	Titlul	Numele Jurnalului, Volumului, Pagina nr.	Autori (Nume și prenume)	Editura	An apariție	Cod ISBN/ISSN
1	Jurnal ISI	Texture and interface characterization of iridium thin	Journal of Materials Science, doi: 10.1007/s10853-	Lucian Trupina, Liviu Nedelcu,	Springer US	2019	Online ISSN: 1573-4803

		films grown on MgO substrates with different orientations.	019-04004-7	Marian Gabriel Banciu, Aurelian Crunteanu, Laure Huitema, Cătălin Constantinescu, Alexandre Boule			
2	Articol in volum, de conferinta CONFERN-TA ESTE ISI	New half-cylinder microstrip fed dielectric resonator antennas with improved impedance bandwidth	Proceedings of the European Microwave Conference in Central Europe, EuMCE, May 13-15, 2019, Prague, Czech Republic, pp. 183-186, 2019	Banciu Marian Gabriel, Nedelcu Liviu, Avadanei Ovidiu Gabriel, Militaru Nicolae, Geambasu Cezar Dragos, Trupina Lucian	EuMA	2019	ISBN 978-2-87487-066-8 EuMCE2019 online
3	Articol in volum, de conferinta CONFERN-TA ESTE ISI	Microwave activities in Romania	Proceedings of the European Microwave Conference in Central Europe, EuMCE, May 13-15, 2019, Prague, Czech Republic, pp. 221-224, 2019	Banciu Marian Gabriel, Tamas Razvan, Militaru Nicolae.	EuMA	2019	ISBN 978-2-87487-066-8 EuMCE2019 online
4	Articol in volum, de conferinta CONFERN-TA ESTE ISI	Frequency selective surfaces with hexagonal elements for millimeter waves applications	CAS 2019 Proceedings, 2019 International Semiconductor Conference, October 9-11, Sinaia, România, pp. 61-64	Banciu Marian Gabriel, Geambasu Cezar Dragos, Nedelcu Liviu, Trupina Lucian	IEEE	2019	ISBN: 978-1-7281-1887-1
5	Articol in volum, de conferinta CONFERN-TA ESTE ISI	Beoadband Y-type divider in Ku-band using substrate integrated waveguide	CAS 2019 Proceedings, 2019 International Semiconductor Conference, October 9-11, Sinaia, România, pp. 57-60	Fu Y., Chan K. Y., Banciu Marian Gabriel, Ramer Rodica	IEEE	2019	ISBN: 978-1-7281-1887-1
6	Articol in volum (2 pagini), de conferinta	Extrinsic absorption in spark plasma sintered	Proceedings of the 44 th International Conference on	Nedelcu Liviu, Burdusel Mihai,	IEEE	2019	ISBN: 978-1-5386-8285-2

	CONFERIN-TA ESTE ISI 2 pages	Zr _{0.8} Sn _{0.2} TiO ₄ ceramics investigated by terahertz time-domain spectroscopy	Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves, 1-6 September 2019, Paris, France, 2 pages	Grigoroscuta Mihai A., Geambasu Cezar Dragos, Banciu Marian Gabriel, Badica Petre.			
7	Capitol de carte	Bioceramics derived from marble and sea shells as potential bone substitution materials.	Bioceramics and Biocomposites: From Research to Clinical Practice, John Wiley & Sons, 2019, pp. 87–122	F. Miculescu, A.C. Mocanu, G.E. Stan, A. Maidaniuc, M. Miculescu, S.I. Voicu, I. Antoniac	John Wiley & Sons	2019	ISBN: 978-1-119-04934-0
8	Capitol de carte	Control of the Critical Current Density Through Microstructural Design by Ho ₂ O ₃ and Te co-addition into MgB ₂ Processed by Ex Situ Spark Plasma Sintering	Cap 11, in cartea “Superconductivity”	P. Badica, G. Aldica, M. Burdusel, M. Grigoroscuta, A. M. Ionescu, V. Sandu, S. Popa, M. Enculescu, I. Pasuk, and A. Kuncser	Springer	2019	ISBN 978-3-030-23303-7
9	articol in jurnal ISI neindexat in WoS	The interplay of work function and polarization state at the Schottky barriers height for Cu/BaTiO ₃ interface	Applied Surface Science 502, 144101	Dana Georgeta Popescu, Marius Adrian Husanu, Cristina Chirila, Lucian Pintilie, Cristian Mihail Teodorescu	Elsevier	2019	0169-4332
10	articol in volum de conferinta	Controlling SWIR photosensitivity limit by composition engineering: from Ge to GeSi nanocrystals embedded in TiO ₂	Proceedings of IEEE CAS 2019 (International Semiconductor Conference, October 9-11, Sinaia), pp. 37-40	I. Dascalescu, O. Cojocaru, I. Lalau, C. Palade, A. Slav, A. M. Lepadatu, S. Lazanu, T. Stoica, M. L. Ciurea	IEEE	2019	CFP19CAS-USB
11	articol in volum de conferinta	High performance NIR photosensitive	Proceedings of IEEE CAS 2019 (International Semiconductor	I. Stavarache, P. Prepelita, I. Lalau, O. Cojocaru, V.	IEEE	2019	CFP19CAS-USB

		films of Ge nanoparticles in Si ₃ N ₄	Conference, October 9-11, Sinaia), pp. 225-228	S. Teodorescu, M. L. Ciurea			
12	Jurnal ISI	The effect of the ionizing radiation on hydroxyapatite-polydimethylsiloxane layers	acceptat spre publicare in Polymer Engineering and Science	Groza, Andreea; Iconaru, Simona Liliana; Jiga, Gabriel; Chapon, Patrick; Gaiaschi, Sofia; Verga, Nicolae; Beuran, Mircea; Prodan, Alina ; Matei, Mihai; Marinescu, Serban; Trusca, Roxana; Predoi, Daniela	Wiley	2019	Online ISSN:1548-2634
13	BDI	Responses of plants to hydric stress and iron oxide nanoparticles	Agriculture & Food, Volume 7, 2019, Pages: 265-272	Elena Petcu, Lazăr Cătălin, Gabriel Predoi, Carmen Cîmpeanu, Ștefania Mariana Raita, Daniela Predoi, Simona Liliana Iconaru	Science Events Ltd.	2019	ISSN 1314-8591 (online)
14	Capitol de carte	Exact and approximate analytical solutions of Weiss equation of ferromagnetism and their experimental relevance. Experimental aspects (II)	Proceedings of the International Workshop on Advances in Nanomaterials Magurele - Bucharest, September 17-19, 2018. Pag. 127-130.	V. Kuncser	Editura Horia Hulubei, Str. Atomistilor 407, Magurele 77125	mai 2019	978-606-94603-6-8
15	Capitol de carte	An overview on local structure and magnetism of Fe-C nanocomposites	Proceedings of the International Workshop on Advances in Nanomaterials Magurele -	S.G. Greculeasa, F. Dumitrache, I. I. Lungu, N.Iacob, V.	Editura Horia Hulubei, Str. Atomistilor 407, Magurele 077125	mai 2019	978-606-94603-6-8

			Bucharest, September 17-19, 2018. Pag. 27-42	Kuncser			
16	Capitol de carte	Spin configurations in RE-Fe and RE-Fe-B systems and related functionalities	Proceedings of the International Workshop on Advances in Nanomaterials Magurele - Bucharest, September 17-19, 2018. Pag. 51-64	A.E. Stanciu, C. Locovei, G. Schinteie, N. Iacob, V. Kuncser	Editura Horia Hulubei, Str. Atomistilor 407, Magurele 077125	mai 2019	978-606-94603-6-8
17	Proceeding	Superposed Shape Memory and Magnetocaloric Effects of NiFeGa Heusler alloys. Effects of thermal treatments and of Co and Al Substitutions	Proceedings of the International Workshop on Advances in Nanomaterials, Magurele – Bucharest, September 17 – 19, 2018	F. Tolea, M. Sofronie, A. D. Crisan, B. Popescu, M. Tolea	Horia Hulubei Publishing House	2019	ISBN 978-606-94603-9-9
18	articol in volum de conferinta	Magnetoelastic properties in polycrystalline Fe-Pd based ferromagnetic shape memory alloys	8th Conference on Material Science and Engineering, IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering 485, 012026	M Sofronie, B Popescu , AD Crisan , AR Lupu, F Tolea , M Valeanu	IOP Publishing/ IOP Conf. Series	2019	doi: 10.1088/1757-899X/485/1/012026
19	articol in volum de conferinta	Effect of Cr, C, B and Mo substitutions on the structure and magnetic properties of Zr-Co Rare-Earth-free magnetic alloy	8th Conference on Material Science and Engineering, IOP Conf. Series: Materials Science and Engineering 485, 012028	F. Tolea, P.Palade, M. Sofronie, B. Popescu and V. Kuncser	IOP Publishing/ IOP Conf. Series	2019	doi: 10.1088/1757-899X/485/1/012028
20	Superconductivity: From Materials Science to Practical Applications	Chapter 6 “High Vortex activation energies in the AC magnetic response of superconductors close to the DC irreversibility line”		Lucica Miu, Ion Ivan, Alina M. Ionescu, Adrian Crisan, Dana Miu, Traian Petrisor, Paolo Mele	Springer Nature, Switzerland	Online, 2019	ISBN 978-3-030-23303-7
21	articol in volum de conferinta	Channeling of Magnetic Flux in YBa ₂ Cu ₃ O _{7-δ} Superlattices.	Pogrebnjak A., Novosad V. (eds) Advances in Thin Films, Nanostructured	Mollatt H.J., Qureshi T., Crisan A., Dang V.S., Mikheenko P.	Springer, Singapore	2019	Print ISBN 978-981-13-6132-6

			Materials, and Coatings. Lecture Notes in Mechanical Engineering, pp 287-295				Online ISBN 978-981-13-6133-3
22	Superconductivity: From Materials Science to Practical Applications	Ch. 11 "Control of the Critical Current Density Through Microstructural Design by Ho ₂ O ₃ and Te Co-addition into MgB ₂ Processed by Ex Situ Spark Plasma Sintering"		P. Badica, G. Aldica, M. Burdusel, M. Grigoroscuta, A. M. Ionescu, V. Sandu, S. Popa, M. Enculescu, I. Pasuk, A. Kuncser	Springer, Singapore	2019	ISBN 978-3-030-23302-0, https://doi.org/10.1007/978-3-030-23303-7
23	Articol in volum de conferinta	"Extraction of pesticide residues from plant extracts using regenerative MCM41 mesoporous materials"	IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng. 572 012008	M. A. Florea, B. Purcareanu, A. Bicu, V. Drumea, C. E. Gird, M. Grigoroscuta, D. E. Mihaiescu, G. Vasilievici and L. Olariu	IOP	2019	http://iopscience.iop.org/article/10.1088/1757-899X/572/1/012008
24	Articol in volum de conferinta	Investigation of flux jumps during Pulsed Field Magnetization in various MgB ₂ bulks	EUCAS 2019: 14th European Conference on Applied Superconductivity	K. Yokoyama, T. Oka, R. Dorget, M. R. Koblichka, M. A. Grigoroscuta, M. Burdusel, D. Batalu, G. Aldica, P. Badica and M. Murakami	IOP	2019	
25	Articol in volum de conferinta	Extrinsic absorption in spark plasma sintered Zr _{0.8} Sn _{0.2} TiO ₄ ceramics investigated by terahertz time-domain spectroscopy	IRMMW-THz 2019: 44th International Conference on Infrared, Millimeter, and Terahertz Waves	L. Nedelcu, M. Burdusel, M.A. Grigoroscuta, C.D. Geambasu, M.G. Banciu and P. Badica		2019	
26	Articol ISI	Designing functional ferroelectric interfaces from first-principles: Dipoles and	New J. Phys. 21 (2019) 113005	D. Rusu, L. Filip, L. Pintilie, K. T. Butler and N. Plugaru	IOP	2019	https://dx.doi.org/10.1088/1367-2630/ab4d8b

		band bending at oxide heterojunctions					
27	Articol ISI	Superconducting MgB ₂ textured bulk obtained by ex situ spark plasma sintering from green compacts processed by slip casting under a 12 T magnetic field	Superconductor Science and Technology, Volume 32, Number 12 (2019) 125001	M A Grigorescu, V Sandu, A Kuncser, I Pasuk, G Aldica, T S Suzuki, O Vasykiv and P Badica	Elsevier	2019	https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1361-6668/ab4620/pdf

4.2.4. Studii, Rapoarte, Documente de fundamentare sau monitorizare care: a) au stat la baza unor politici sau decizii publice:

Tip document	Nr.total	Publicat în:
Hotărâre de Guvern	1	477/2019 din 4 iulie 2019
Lege	-	
Ordin ministru	1	OM578 din 01.10.2019
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	multe	www.infim.ro
Emisiuni TV	-	-
Emisiuni radio	-	-
Presă scrisă/electronică	6	Market Watch Contributors.ro
Cărți		
Reviste	3	Market Watch
Bloguri	3	Contributors.ro
Altele (<i>se vor preciza</i>)	4	Scoala Altfel Noaptea Cercetatorilor

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

Tip	Anul 2019
Tehnologii	1

Procedee	2
Produse informatice	1
Rețete	5
Formule	1
Metode	-
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	A00284	14.05.2019	Iuga Alin Romulus, Boni Andra Georgia, Pintilie Lucian	Metoda de citire nedistructiva a memoriilor feroelectrice prin detectie piroelectrica
	A00342	06.06.2019	Polosan Silviu Pavel, Pacala Ovidiu	Metoda de tratare a suprafetelor in fascicul de electroni de joasa energie
	A00351	11.06.2019	Badica Petre, Ionescu Alina Marinela, Grigorescu Mihai Alexandru, Burdusel Mihail, Aldica Gheorghe Virgil	Metoda de procesare in mediu activ de sinterizare si banda/fir supraconductoare in teaca metalica usoara cu miez pe baza de MgB2
	A00427	15.07.2019	Banciu Marian Gabriel, Geambasu Cezar Dragos, Besleaga Stan Cristina, Trupina Lucian, Ion Valentin, Scarisoreanu Nicu Doinel	Antena planara de microunde cu geometrie noua a suprafetei radiante
	A00516	28.08.2019	Manta Corina-Mihaela, Samohvalov Dumitru, Gherca Daniel, Baibarac Mihaela, Lungan Maria-Andrea, Smaranda Ion, Barbatu Adrian, Buhalteanu Lucian, Udrescu Adelina, Daescu Monica, Ilie Mirela, Toulbe N'Ghaya	Procedee de preparare si utilizare ale noilor forme cristaline ale 6-(3-metil-5-nitroimidazol-4-il)sulfanil-9H-purinei
	A00578	20.09.2019	Cotarlan Costel	Structura de superlentila cu metasuprafata pentru conversia undelor de interfata in unde de propagare si focalizarea acestora in camp indepartat
	A00612	01.10.2019	Iuga Alin-Romulus, Kuncser Victor Eugen, Iacob Nicusor	Element multiferoic compozit avertizor de prag de intensitate a campului magnetic
	A00705	04.11.2019	Teodorescu Cristian Mihail	Sistem de analiza de timp de zbor in gaz rarefiat, cu

				determinarea separata a dimensiunilor si sarcinii nanoparticulelor si aerosolilor
	A00706	04.11.2019	Teodorescu Cristian Mihail	Sistem de selectie nanoparticule in functie de dimensiuni si sarcina, separat, folosind un filtru electric si magnetic functionand in vid impreuna cu o sectiune de franare intr-o zona cu gaz rarefiat, functionand in regim continuu
	A00716	08.11.2019	Neatu Stefan, Neatu Florentina, Florea Mihaela, Trandafir Mihaela Mirela	Procedeu de reducere fotocatalitica a apei in prezenta de fotocatalizatori eterogeni oxizi mixti de nichel, zinc si titan
	A00715	08.11.2019	Husanu Marius-Adrian, Popescu Dana Georgeta	Metoda de preparare a straturilor cristaline de nichel
	A00723	11.11.2019	Boni Andra-Georgia, Chirila Cristina Florentina, Pintilie Lucian	Metoda de caracterizare dielectrica a structurilor feroelectrice in relatie cu reversarea polarizarii
	A000737	13.11.2019	Iuga Alin-Romulus, Lazar Marian, Iacob Nicusor	Cuplaj magneto-mecanic cuadripolar
	A000738	13.11.2019	Baibarac Mihaela, Mateescu Alice-Ortansa, Mateescu Gheorghe	Procedee de imbunatatire a aderenței straturilor subtiri, depuse pe materiale textile din dispersii coloidale de nanomateriale semiconductoare, metalice sau nemetalice, pentru functionalizarea acestora
	A000745	15.11.2019	Ion Ivan, Gheorghe Virgil Aldica, Enculescu Monica, Miu Lucica, Ionescu Alina-Marinela, Ioan Adrian Crisan	Acoperiri supraconductoare de $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ cu centri de fixare artificiali cu structura mixta si procedeu de obtinere
	U00026	05.08.2019	Secu Mihail, Galca Aurelian Catalin, Polosan Silviu Pavel, Gavrila Alexandru, Cioca Mihai, Dobrescu Gabriel, Ighigeanu Adelina Maria	Dispozitiv pentru detectarea insemnelor de securizare documente, tip „up-conversion”
	U00027	17.09.2019	Cioca Mihai, Ighigeanu Adelina Maria, Dobrescu Gabriel, Evanghelidis Alexandru, Matei Elena, Enculescu Ionut Marius, Jelea Constantin	Instalatie pentru obtinerea prin centrifugare a straturilor fibrilare din polimeri incluzand biopolimeri
	U00038	13.11.2019	Galatanu Andrei, Cioca Mihai, Galatanu Magdalena, Popescu Bogdan, Enculescu Monica	Matrita cu geometrie tronconica pentru controlul precis al temperaturii in cadrul sudarii prin difuzie termica sau brazarii materialelor dedicate

				aplicatiilor in conditii extreme
	U00039	13.11.2019	Galatanu Andrei, Cioca Mihai, Ighigeanu Adelina Maria, Ruiu George-Daniel	Matrita segmentata pentru sinterizarea de pulberi nanometrice in piese complexe cu forma finala
USPTO	62/784,076	21.12.2018	Multicomponent programmable memory	V. Dumitru, A. Velea, C. Besleaga Stan, A. C. Galca, L. Balescu, L. Pintilie
	62/784,082	21.12.2018	Programmable resistive memory with multiple states and method of making same	V. Dumitru, A. Velea, C. Besleaga Stan, A. C. Galca, L. Balescu, L. Pintilie

Mentiune: Brevetele USPTO sunt rezultatul serviciilor de cercetare prestate catre o firma privata in baza unui contract care prevede cesiunea drepturilor de proprietate intelectuala catre firma, si care s-a derulat si in anul 2019.

4.4. Structura de personal:

Personal CD (Nr.)	Anul 2019
Total personal	308
Total personal CD	230
cu studii superioare	212
cu doctorat	152
doctoranzi	22

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

Nr.	Nume și prenume	Grad	Funcția	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	Data	Valoarea	Sursa	Valoarea finanțării	Nr. Ore-om de
------------	-------------	-------------	-----------------	--------------	----------------------------	----------------------

	infrastructură/obiect/bază de date...	achiziției	achiziției (lei)	finanțării	infrastructurii din bugetul Progr. Nucleu	utilizare a infrastructurii pentru Programul-nucleu
1.						
2.						

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

	Nr.	Tip
Proiecte internaționale		2 ERC, 1 CERN, 1 Norvegia
Proiecte naționale		155 PNCDI III (103 PED ; 6 PTE-partener ; 23 TE si 23 PD)

6. Rezultate transferate în vederea aplicării :

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

	Nr. ctr./Fact.	Beneficiar	Val. Contract fara TVA	Val. Contract cu TVA	Denumire
1	Ctr. 1139/18.07.2014(CW245056/2014)	S.C. ZENTIVA S.A.			Difractie de raze X(XRD)
	F.1/14.01.2019				
	F.4/30.01.2019				
	F.5/05.02.2019				
	F.10/18.03.2019				
	F.15/22.03.2019				
	F.19/09.04.2019				
	F.24/09.05.2019				
	F.26/27.05.2019				
	F.29/07.06.2019				
	F.32/03.07.2019				
	F.33/09.07.2019				
	F.36/02.08.2019				
	F.46/10.10.2019				
	F.49/24.10.2019				
2	CTR.661/29.01.2019	INFOMED FLUIDS	8,000.00	9,520.00	SEM
	F.8/11.03.2019				
3	CTR.388/21.02.2019	CAB.AVOCAT	1,000.00	1,190.00	SEM
	F.17/26.03.2019				
4	CTR.389/21.02.2019	TITAN STEEL 1921	1,000.00	1,190.00	SEM
	F.16/26.03.2019				

5	Com.1901-0235/29.01.2019 F.18/01.04.2019	SINDAN-PHARMA	12,000.00	14,280.00	SEM
6	ACT ADIT.CTR.661/29.01.19 21/17.04.2019	INFOMED FLUIDS	3,000.00	3,570.00	SEM
7	Ctr.1542/08.07.2019 F.34/12.07.2019	I.N.F.L.P.R.	16,806.00	20,000.00	TEM
8	CTR.1778/08.08.2019 F41/06.09.2019	INTELLECTRO IASI	158,000.00	188,020.00	Raman
9	CTR.1601/15.07.2019 F.42/06.09.2019	AV.MOGOS ANDRA	2,000.00	2,380.00	SEM
10	CTR.2145/30.09.2019 F.45/10.10.2019	I.N.C.D.F.L.P.R.	4,621.85	5,500.00	Megnetometrie
11	Com.1908-1643 F.50/25.10.2019	SINDAN PHARMA	3,272.78	3,894.61	RES

Contractele cu mediul privat sau cu alte institutii de cercetare mentionate mai sus au ca obiect caracterizarea de materiale utilizand infrastructura si expertiza existente in INCDFM. In acest sens, putem vorbi de un transfer de cunoastere catre beneficiari.

In perioada 2018-2019 a fost derulat si un contract de transfer efectiv al unor rezultate in vederea aplicarii. Beneficiarul contractului a fost firma Cyber Swarm (<https://www.cyber-swarm.net/>). Prin acest contract au fost dezvoltate in INCDFM structuri de tip memristor ce vor fi utilizate in aplicatii de tip cripto-locker. Drepturile de proprietate intelectuala au fost cesionate catre beneficiar in schimbul a 30 % din valoarea contractului. Au rezultat 2 aplicatii de patent USPTO.

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

In perioada 28-29 mai s-a desfasurat a 4-a editie a evenimentului International Workshop of Materials Physics (IWMP).

Anunt workshop

First Announcement



4th edition of the INTERNATIONAL WORKSHOP OF MATERIALS PHYSICS

The National Institute of Materials Physics (NIMP) announces the organization of the 4th edition of the International Workshop of Materials Physics (IWMP). The topic for 2019 edition is dedicated to energy, with special focus on topics such as: photovoltaics (novel photo-effects, halide perovskites, new architectures for solar cells, etc.), energy harvesting (piezo, pyro, thermoelectric), fusion, energy storage, energy transport, and other similar topics. Aspects related to modeling, fabrication, characterization will be presented and discussed. Similar to the first three editions, the 4th edition of IWMP is organized on invitation only. The aim is to attract well known researchers in the field, the final purpose being to establish new collaborations concretized in common publications, projects and exchange of personnel.

Young researchers willing to present their latest results on topics related to the main topic of the workshop are invited to submit a 2 page abstract (A4, Times New Roman 11, single spacing, 2 cm margins, including figures and references) to the organizers (pintilie@infim.ro). The best abstracts will be selected for oral presentations during the workshop.

The workshop will take place at NIMP premises located in Magurele, Romania.

The topics for the next two editions:

2020-Materials and structures for bio-applications

2021-Recent developments in the field of ferroelectrics and multiferroics

Program workshop (site <http://infim.ro/event/4th-edition-of-the-international-workshop-of-materials-physics/>)

IWMP, 28-29 May 2019

28 of May

8:15-8:50 Registration

8:50-9:00 Opening

9:00-11:15 Session 1 (Enculescu, Pintilie)

9:00-9:30

Magdalena Titirici, Department of Chemical Engineering, Imperial College London, UK

Going green with black: On Biomass, Carbon and Clean Energy

9:30-10:00

Vladimir Matolin, Charles University, Czech Republic

PEM Based Ordered Superstructures as a Durable Support for Fuel Cell Catalyst.

10:00-10:30

Ifan Stephens, Imperial College London, UK

Power-to-X: the role of catalysis in advancing the electrochemical synthesis of our most coveted chemicals

10:30-11:15

M. Florea

Cost efficient oxygen generation through alkaline water electrolysis using Ni on SnO₂ mesoporous support-based electrocatalysts

A. Nicolaev

Carbon monoxide adsorption, dissociation and oxidation on ferroelectric surfaces decorated with nanoparticles of noble metals

S. Neatu

The use of three-component composites in the photocatalytic water splitting reaction

11:15-11:30 Coffee break

11:30-13:00 Session 2 (Pintilie, Florea)

11:30-12:00

Joe Briscoe, Queen Mary University London, UK

Sustainable energy devices using nanostructured polar materials

12:00-12:30

Andrew Holmes, Imperial College London, UK

Piezoelectric Devices for Energy Harvesting from Motion and Flow

12:30-13:00

Sam Cooper, Imperial College London, UK

Multilength scale characterisation of materials, microstructures and performance of batteries and fuel cells.

13:00-14:30 Lunch

14:30-16:30 Session 3 (Polosan)

14:30-15:00

Marin Alexe, University of Warwick, UK

Bulk- and Flexo-Photovoltaic effects

15:00-15:30

G. A. Nemnes

Measurement protocols for a reliable electrical characterization of perovskite solar cells

15:30-16:00

Anca Duta, Transilvania University Brasov

VIS-active photocatalytic composites for advanced wastewater treatment

16:00-16:30

L. Leonat

Reticulated mesoporous TiO₂ scaffold for hybrid perovskite solar cells

M. Grigoroscuta

Improved performance of a Si-solar cell by up-conversion in Yb/Er doped CeO₂ thin films

16:30-18:00

Visit to NIMP facilities

18:00 departure for dinner

29 of May

9:00-11:15 Session 4 (Andrei Galatanu)

9:00-9.30

Andrei.V. Kovalevsky, CICECO – Aveiro Institute of Materials, Department of Materials and Ceramic Engineering, University of Aveiro, Portugal

Selected approaches for designing oxide thermoelectrics

9:30-10:00

Andres Sotelo, ICMA-CSIC-Universidad de Zaragoza, Spain

Very high thermoelectric performances in Sr-doped textured Ca₃Co₄O₉. Costs optimization of unileg thermoelectric generator fabrication.

10:00-10:30

Ernst Bauer, Technische Universität Wien, Austria

Bulk and thin film Heusler alloys as promising thermoelectric materials

10:30-11:15

B. Popescu

Thermoelectric nano-composite from double filled skutterudite and carbides

I. Mercioniu

On the adherence of ceramic layers for thermal barriers coatings

M. Galatanu

Development of thermal barriers materials with application in energy

11:15-11:30 Coffee break

11:30-13:15 Session 5 (Ghica, Polosan)

11:30-12:00

Mihai A. Gîrțu, Department of Physics and Electronics, Ovidius University of Constanța, Constanța, Romania

DFT Calculations of Structure and Electronic Properties of TiO₂ Nanoclusters, of Dye-Nanocluster and Dye-Electrolyte Systems for Modeling Hybrid Photovoltaic and Photocatalytic Applications

12:00-12:30

Chris Chikere, School of Pharmacy and Life Sciences, Robert Gordon University, Aberdeen, UK

New Electrode Materials for Energy Storage Devices-Battery Applications

12:30-13:15

O. Rasoga

Tryphenylamine and carbazol oligomers for photovoltaic applications

S. Polosan

Organometallic compounds for photovoltaic applications

M. Baibarac

Composites based on carbon nanotubes and polydiphenylamine: from the functionalization process to applications in the energy storage field

13:15-14:45 Lunch

14:45-17:00 Session 6 (Teodorescu)

14:45-15:15

Ibrahim Burc Misirlioglu, Sabanci Univeristy Istanbul, Turkey

Functionality from ferroelectric superlattices: Designing a phase transition and its implications for applications

15:15-15:45

Andrei Manolescu, University of Reykjavik, Iceland

Excitons in core-shell nanowires with polygonal cross section

15:45-16:15

L. Abramiuc

Photoelectron spectromicroscopy: revealing the stability of ferroelectric surfaces with respect to irradiation and contamination

A. Crisan

Nanotechnology of Pinning Centres in Superconducting Films for Clean Energy-saving Power Applications

16:15-16:30 Closing

8. Aprecieri asupra derulării programului și propuneri:

Programul Nucleu in 2019 a inceput cu o intarziere de cateva luni, ceea ce a generat numeroase probleme in activitatea curenta a institutului. Este totusi de apreciat ca este primul program Nucleu pe o perioada de 4 ani.

Un alt element care a generat unele probleme este legat de faptul ca suma alocata pentru 2019 a fost inferioara sumei solicitate in propunerea depusa la competitie, ceea ce a necesitat redimensionarea activitatilor in sensul in care unele etape prevazute in propunere nu au mai fost finantate. Cu toate acestea, indicatorii asumati prin propunerea de program Nucleu sunt indepliniti in proportie de cel putin 30 %, ceea ce creaza premise solide pentru atingerea tintelor asumate la finalul programului Nucleu.

Merita punctate cateva rezultate deosebite:

- Cercetarile si rezultatele obtinute in cadrul programului Nucleu au fundamentat o aplicatie ERC Consolidator Grant (aplicant dr. Mihaela Florea), care a trecut de prima etapa de evaluare, fiind

invitat pentru interviu in septembrie 2019. Chiar daca propunerea nu va fi finantata, faptul ca s-a ajuns la interviu constituie un rezultat deosebit, avand in vedere numarul extrem de redus de aplicatii ERC care pleaca din tara, cu institutie gazda din tara.

- Cercetarile si rezultatele preliminare obtinute in cadrul programului Nucleu au fundamentat si solutii tehnice pentru problemele ridicate de firme private, acestea fiind valorificate sub forma de contracte subsidiare in cadrul celor doua proiecte de tip POC-G in derulare in INCDFM. In momentul de fata sunt incheiate 13 contracte subsidiare, 5 dintre ele fiind negociate si semnate in 2019.
- Este remarcabil numarul mare de lucrari publicate in jurnale cu factor mare de impact (quartila Q1). A fost publicata o lucrare in Nature, plus inca 5 lucrari in jurnale cu factor de impact peste 7. Circa 50 % din lucrarile publicate sunt cu colaboratori din tara sau strainatate, ceea ce subliniaza vizibilitatea INCDFM ca institutie de cercetare de elita din Romania, precum si calitatea cercetarii care se desfasoara in INCDFM.

Web of Science iNCites Journal Citation Reports Essential Science Indicators EndNote Publons Kopernio Sign In Help English

Web of Science

Search Tools Searches and alerts Search History Marked List

Results: ...
(from Web of Science Core Collection)

You searched for: ORGANIZATION-ENHANCED: (national institute of materials physics romania) ...[More](#)

Create an alert

Refine Results

Search within results for...

Filter results by:

Open Access (43) Refine

Publication Years

2019 (170) Refine

Web of Science Categories

- MATERIALS SCIENCE MULTIDISCIPLINARY (67)
- PHYSICS APPLIED (43)
- CHEMISTRY PHYSICAL (37)
- PHYSICS CONDENSED MATTER (34)
- MATERIALS SCIENCE COATINGS FILMS (20)

[more options / values...](#) Refine

Source Titles Refine Exclude Cancel Sort these by: Record Count

The first 100 Source Titles (by record count) are shown. For advanced refine options, use [Analyze results](#).

<input type="checkbox"/> APPLIED SURFACE SCIENCE (11)	<input type="checkbox"/> THIN SOLID FILMS (2)	<input type="checkbox"/> JOURNAL OF PHYSICS AND CHEMISTRY OF SOLIDS (1)
<input type="checkbox"/> MATERIALS (8)	<input type="checkbox"/> ACS APPLIED MATERIALS INTERFACES (1)	<input type="checkbox"/> JOURNAL OF PHYSICS CONDENSED MATTER (1)
<input type="checkbox"/> SCIENTIFIC REPORTS (7)	<input type="checkbox"/> ACS APPLIED NANO MATERIALS (1)	<input type="checkbox"/> LIQUID CRYSTALS (1)
<input type="checkbox"/> JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS (6)	<input type="checkbox"/> ACS OMEGA (1)	<input type="checkbox"/> MATERIALS CHARACTERIZATION (1)
<input type="checkbox"/> CERAMICS INTERNATIONAL (5)	<input type="checkbox"/> ACS SENSORS (1)	<input type="checkbox"/> MATERIALS RESEARCH BULLETIN (1)
<input type="checkbox"/> NANOMATERIALS (5)	<input type="checkbox"/> ANALYTICAL CHEMISTRY (1)	<input type="checkbox"/> MATERIALS SCIENCE AND ENGINEERING B ADVANCED FUNCTIONAL SOLID STATE MATERIALS (1)
<input type="checkbox"/> BELSTEIN JOURNAL OF NANOTECHNOLOGY (4)	<input type="checkbox"/> ANNALEN DER PHYSIK (1)	<input type="checkbox"/> METALLURGICAL AND MATERIALS TRANSACTIONS A PHYSICAL METALLURGY AND MATERIALS SCIENCE (1)
<input type="checkbox"/> PHYSICAL REVIEW B (4)	<input type="checkbox"/> APL MATERIALS (1)	<input type="checkbox"/> MICROPOROUS AND MESOPOROUS MATERIALS (1)
<input type="checkbox"/> FUSION ENGINEERING AND DESIGN (3)	<input type="checkbox"/> APPLIED ORGANOMETALLIC CHEMISTRY (1)	<input type="checkbox"/> MODELLING AND SIMULATION IN MATERIALS SCIENCE AND ENGINEERING (1)
<input type="checkbox"/> PHYSICA STATUS SOLIDI B BASIC SOLID STATE PHYSICS (3)	<input type="checkbox"/> APPLIED PHYSICS LETTERS (1)	<input type="checkbox"/> MOLECULES (1)
<input type="checkbox"/> SURFACE COATINGS TECHNOLOGY (3)	<input type="checkbox"/> CATALYSIS SCIENCE TECHNOLOGY (1)	<input type="checkbox"/> NATURE (1)
<input type="checkbox"/> ANGEWANDTE CHEMIE INTERNATIONAL EDITION (2)	<input type="checkbox"/> CHEMPUSCHEM (1)	<input type="checkbox"/> NEW JOURNAL OF PHYSICS (1)
<input type="checkbox"/> APPLIED CATALYSIS A GENERAL (2)	<input type="checkbox"/> CHEMSUSCHEM (1)	<input type="checkbox"/> NUCLEAR INSTRUMENTS METHODS IN PHYSICS RESEARCH SECTION B BEAM INTERACTIONS WITH MATERIALS AND ATOMS (1)
<input type="checkbox"/> APPLIED CATALYSIS B ENVIRONMENTAL (2)	<input type="checkbox"/> CRYSTAL GROWTH DESIGN (1)	<input type="checkbox"/> NUOVO CIMENTO C COLLOQUIA AND COMMUNICATIONS IN PHYSICS (1)
<input type="checkbox"/> APPLIED PHYSICS A MATERIALS SCIENCE PROCESSING (2)	<input type="checkbox"/> ENERGY TECHNOLOGY (1)	<input type="checkbox"/> OPTICAL AND QUANTUM ELECTRONICS (1)
<input type="checkbox"/> CATALYSIS TODAY (2)	<input type="checkbox"/> ENTROPY (1)	<input type="checkbox"/> ORGANIC ELECTRONICS (1)
<input type="checkbox"/> CAVE AND KARST SYSTEMS OF ROMANIA (2)	<input type="checkbox"/> EUROPEAN BIOPHYSICS JOURNAL WITH BIOPHYSICS LETTERS (1)	<input type="checkbox"/> PHILOSOPHICAL MAGAZINE (1)
<input type="checkbox"/> CAVE AND KARST SYSTEMS OF THE WORLD (2)	<input type="checkbox"/> IEEE JOURNAL OF THE ELECTRON DEVICE SOCIETY (1)	<input type="checkbox"/> PHYSICA STATUS SOLIDI A APPLICATIONS AND MATERIALS SCIENCE (1)
<input type="checkbox"/> CHEMCATCHEM (2)	<input type="checkbox"/> INTERNATIONAL JOURNAL OF HYDROGEN ENERGY (1)	<input type="checkbox"/> PHYSICA STATUS SOLIDI RAPID RESEARCH LETTERS (1)
<input type="checkbox"/> COATINGS (2)	<input type="checkbox"/> JOURNAL OF CATALYSIS (1)	<input type="checkbox"/> PHYSICAL REVIEW APPLIED (1)
<input type="checkbox"/> CURRENT APPLIED PHYSICS (2)	<input type="checkbox"/> JOURNAL OF CLEANER PRODUCTION (1)	<input type="checkbox"/> PHYSICAL REVIEW MATERIALS (1)
<input type="checkbox"/> DIGEST JOURNAL OF NANOMATERIALS AND BIOSTRUCTURES (2)	<input type="checkbox"/> JOURNAL OF COORDINATION CHEMISTRY (1)	<input type="checkbox"/> PLOS ONE (1)
<input type="checkbox"/> ELECTROCHIMICA ACTA (2)	<input type="checkbox"/> JOURNAL OF ELECTROANALYTICAL CHEMISTRY (1)	<input type="checkbox"/> POWDER TECHNOLOGY (1)
<input type="checkbox"/> JOURNAL OF LUMINESCENCE (2)	<input type="checkbox"/> JOURNAL OF ELECTRON SPECTROSCOPY AND RELATED PHENOMENA (1)	<input type="checkbox"/> PROCESSING AND APPLICATION OF CERAMICS (1)

Propuneri pentru imbunatatirea derularii programului Nucleu:

- Transformarea programului Nucleu intr-un program real multianual, extins pe durata unui ciclu al Strategiei Nationale CDI si al Programului Cadru al UE.
- Finantarea sa fie deschisa imediat ce incepe noul an, pentru a se evita intrarea in incapacitate de plata a institutelor nationale. Merita subliniat faptul ca, in lipsa unor competitii periodice in cadrul Programului National CDI, programul Nucleu este singura sursa de finantare decenta a INCD-urilor. In lipsa acestuia cresc riscurile pierderii resursei umane si al deteriorarii infrastructurii.

DIRECTOR GENERAL,

DIRECTOR DE PROGRAM,

DIRECTOR ECONOMIC,

Nume și Prenume
Dr. Ionut Enculescu

Nume și Prenume
Dr. Lucian Pintilie

Nume și Prenume
Ec. Gabriela Ivanus

Semnătura

Semnătura

Semnătura