

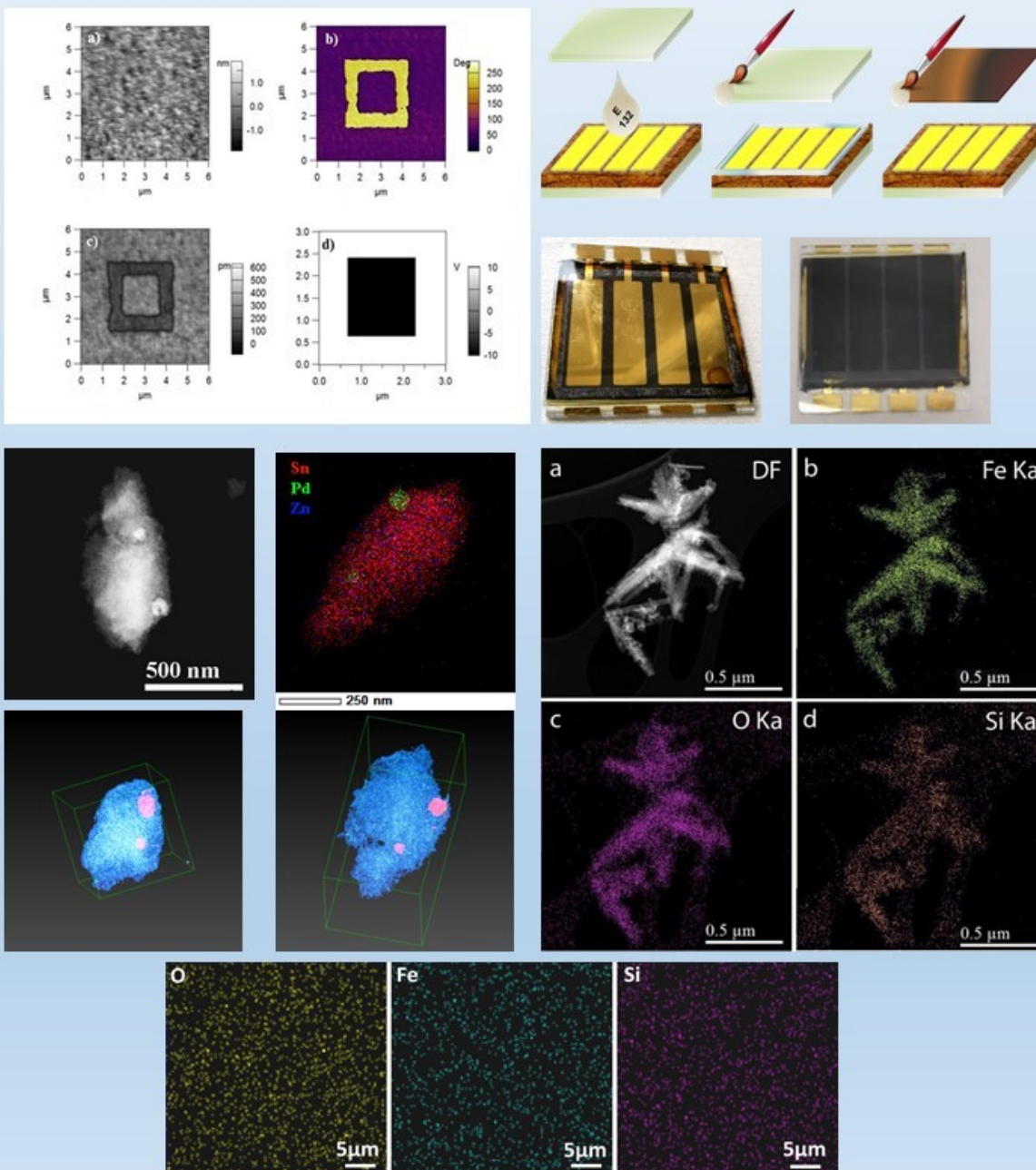
**INSTITUTUL NATIONAL DE CERCETARE
DEZVOLTARE PENTRU FIZICA MATERIALELOR**

Strada Atomistilor 405A, 077125 Magurele-Ilfov, C.P. MG-7

Telefon: +40(0)21 3690185, Fax: +40(0)21 3690177, email: director@infim.ro, http://www.infim.ro

Raport anual Program Nucleu 2021

***Cercetari teoretice si experimentale in domeniul
materialelor multifunctionale avansate pentru
competitivitate economica si dezvoltare durabila
(TEXMAV); PN19-03010***



Anexa nr. 14 la Contract nr. 21N/2019
Contractor : INCD Fizica Materialelor
Cod fiscal: RO9068280

RAPORT ANUAL DE ACTIVITATE
privind desfășurarea programului nucleu
Cercetări teoretice și experimentale în domeniul materialelor multifuncționale
avansate pentru competitivitate economică și dezvoltare durabilă (TEXMAV); PN19-
03010
(denumire, acronim, cod)
anul 2021

Durata programului: 4 ani

Data începerii: 2019

Data finalizării: 2022

1. Scopul programului:

Obiectivul principal:

Desfășurarea de cercetări teoretice și experimentale în domeniul fizicii stării condensate, al materialelor multifuncționale avansate și al altor domenii conexe din fizică, cu accent pe sisteme nano-dimensionale, suprafețe și interfețe, cu potențial de aplicații în domenii de înaltă tehnologie, pentru creșterea competitivității economice și dezvoltare durabilă.

Programul propus pentru perioada 2019-2022 continuă direcțiile de cercetare deschise prin programul desfășurat în anul 2018, încercând o apropiere și mai mare de specializările inteligente și domeniile de interes național prevăzute în Strategia Națională CDI 2014-2020. În plus față de programul Nucleu precedent, noul program își propune să aducă o creștere și mai accentuată a gradului de multidisciplinaritate a cercetărilor desfășurate în institut, precum și o creștere a sinergiei tematice cu noile direcții de cercetare în domeniu așa cum sunt ele enunțate în strategiile și programele naționale sau la nivel de Comunitate Europeană. Activitățile prevăzute în cadrul programului vor implica practic toate grupurile de cercetare din institut într-un efort unit de creștere a performanței instituționale și de transformare a INCDFM într-un actor important la nivel global în ceea ce privește dezvoltările fundamentale și aplicative în domeniile abordate în program.

În definirea principalelor direcții tematice din această strategie s-a ținut cont de:

- Strategia Națională CDI 2014-2020, care focalizează cercetările pe 4 domenii de specializare inteligentă și pe 4 domenii de interes național (Bio-economie; TIC, spațiu și securitate; Eco-nano tehnologii și materiale avansate; Energie, mediu și schimbări climatice; Sănătate; Patrimoniu cultural; Tehnologii noi și emergente; Cercetare fundamentală și de frontieră). INCDFM poate contribui la toate acestea prin dezvoltarea de materiale avansate și de metode specifice de investigare și analiză.

- Tendințele tematice din ultimii 5 ani, care au reliefat un interes din ce în ce mai accentuat către direcții noi de cercetare, legate în special de sănătate, calitatea vieții și a mediului, resurse energetice regenerabile, tehnologii pentru dezvoltare durabilă, materiale pentru aplicații în condiții extreme de lucru.

Structurarea direcțiilor strategice de cercetare ia în considerare faptul că cercetarea fundamentală este cea care stă la baza progresului, indiferent dacă este vorba de cunoaștere sau de tehnologie. Nu se poate imagina progres economic și social fără o componentă puternică de cercetare

fundamentală care să ofere soluții noi la provocările prezentului și viitorului apropiat. Cercetarea fundamentală îmbină modelări și simulări teoretice cu cercetare experimentală pentru verificarea teoriilor și demonstrarea viabilității noilor soluții, în cazul de față în domeniul materialelor avansate funcționale și a metodelor specifice de investigare. Rezultatele vor fi apoi valorificate în cercetări aplicative și dezvoltări experimentale, mergând până la producerea de modele experimentale, prototipuri și chiar transfer tehnologic către mediul privat. Ca urmare, au fost propuse următoarele direcții tematice/obiective specifice de cercetare pentru perioada 2018-2020:

Tematica 1 - Cercetări fundamentale la frontiera cunoașterii în fizica stării condensate și a materialelor avansate (în relație cu domeniul Cercetare Fundamentală din SN-CDI), corelat și cu formare profesională avansată în fizică și domenii conexe

Cuprinde partea de cercetare fundamentală, modelare, simulare teoretică, validare de concepte și idei prin experimente dedicate (fenomene la scală nano în materiale feroice, materiale 2D, fenomene optice neliniare, fizica suprafețelor și interfețelor, defecte structurale și simularea impactului lor asupra fenomenelor fizice, etc.). Rezultatele vor constitui baza de cunoaștere utilă pentru Tematica 2, în primul rând, ajutând la proiectarea și realizarea de noi materiale și structuri funcționale, dar și pentru Tematicile 3 și 4, orientate către aplicații mai punctuale în domeniile de specializare inteligentă cărora le sunt adresate. În cadrul acestei tematici sunt incluse și activitățile de formare profesională pentru tineri cercetători, formarea profesională continuă pentru cercetători cu experiență, precum și activitățile de atragere a unor cercetători de valoare din străinătate să vină și să lucreze în INCDFM și la CIFRA.

Tematica 2 - Cercetări privind prepararea, caracterizarea și optimizarea materialelor multifuncționale avansate (în relație cu domeniul de specializare inteligentă „Eco-nanotehnologii și Materiale Avansate”)

Cuprinde totalitatea cercetărilor pentru dezvoltarea de materiale avansate, respectiv metode ecologice de preparare, caracterizare structurală avansată, investigarea proprietăților fizice și a potențialului de aplicații. Materialele preparate și investigate în această direcție vor alimenta în continuare aplicațiile dezvoltate în cadrul Tematicilor 3 și 4, după ce se stabilește care este potențialul pentru aplicații și nișa din economie care oferă o valorificare maximală a rezultatelor cercetării.

Tematica 3 - Materiale, structuri și metode cu potențial de aplicații în științele vieții (în relație cu domeniile de specializare inteligentă Bioeconomie și Sănătate)

Cuprinde cercetarea pe partea de materiale și metode cu utilitate în Bioeconomie (bio-senzori, procesarea catalitică a deșeurilor organice, monitorizarea calității alimentelor, metode moderne de conservare a alimentelor, metode și dispozitive de combatere a dăunătorilor) și Sănătate (materiale biocompatibile, metode și materiale pentru livrarea țintită a medicamentelor, metode și materiale noi pentru terapie neinvazivă, metode aplicate în industria medicamentului, etc.).

Tematica 4 - Cercetări aplicative și dezvoltări experimentale în domeniul materialelor funcționale pentru aplicații de înaltă tehnologie (în relație cu domeniile „Tehnologii Emergente”, „TIC, Spațiu și Securitate”, „Energie, Mediu și Schimbări Climatice” și „Patrimoniu cultural”)

Cuprinde, în principal, cercetare aplicativă și dezvoltare experimentală în domeniul tehnologiilor inovative și al materialelor/structurilor multifuncționale cu potențial de aplicații în domenii de înaltă și foarte înaltă tehnologie cum sunt TIC, spațiu și securitate (diverse dispozitive electronice, dispozitive de memorare a informației, comunicații fără fir sau prin metode optice, senzorială pentru automatizări și monitorizarea diferitelor elemente cu impact asupra confortului și siguranței personale, etc.), energie (cu aspecte legate de surse regenerabile de energie, stocare, transport și economisire) sau mediu (monitorizarea poluării, eliminarea sau reciclarea poluanților, eliminarea gazelor cu efect de seră și altele similare). În ceea ce privește patrimoniul cultural, se au în vedere atât material care să securizeze bunurile de patrimoniu cât și metode inovative de analiză a materialelor componente.

Domeniile de specializare inteligentă și domeniile de interes național la implementarea și progresul cărora Programul Nucleu al INCDFM poate aduce contribuții esențiale:

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

Prin domeniul său de activitate, INCDFM se încadrează perfect în această specializare inteligentă. Materialele avansate funcționale constituie baza aplicațiilor de înaltă tehnologie din industrii de vârf precum electronică, transporturi, energetică, apărare, etc. La nivel mondial se fac eforturi în cercetarea pe câteva direcții principale: 1) miniaturizarea anumitor componente electronice ceea ce implică studiul efectelor de dimensiune în materiale funcționale; 2) generarea și caracterizarea de sisteme cu dimensionalitate redusă și cu funcționalități utile în aplicații high-tech (ex. gaz 2D de electroni la interfețe; sisteme 2D similare grafenei, nanofire, etc.); 3) reducerea amprente de carbon a tehnologiilor utilizate în obținerea materialelor avansate și a aplicațiilor aferente lor; 4) înlocuirea materialelor deficitare cu altele abundente în natură; 5) scăderea costurilor de producție a materialelor cu scopul de a face anumite aplicații accesibile pentru cât mai multă lume (ex. „casa verde”); 6) dezvoltarea de sisteme inteligente de tip „clădire inteligentă” sau „oraș inteligent”, care necesită materiale avansate pentru senzori, comunicații, stocare de date, etc.

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

Și la această specializare inteligentă INCDFM își poate aduce contribuția dezvoltând materiale și aplicații pentru comunicații fără fir în special în cazul tehnologiilor bazate pe microunde, pentru prelucrarea și stocarea informației (memorii nevolatile), pentru diferite tipuri de senzori utilizabili în aplicații de securitate (în special în domeniul CBRNE detecție de substanțe interzise, protecție de perimetru, etc.) sau de spațiu (ex. detecție de IR, microunde, etc.)

- **ENERGIE, MEDIU ȘI SCHIMBĂRI CLIMATICE**

Este un domeniu relansat în INCDFM în ultimii ani. Se pot aduce contribuții considerabile pe urmatoarele direcții: 1) surse regenerabile de energie, cum ar fi celule solare pe bază de efect fotovoltaic folosind materiale noi, abundente în natură și tehnologii de cost redus; celule de combustie bazate pe electroliți solizi; 2) materiale pentru stocare de energie cum ar fi nanocompozite pentru supercapacitori și baterii cu timp de viață îndelungat și capacitate mare de stocare de sarcină electrică sau materiale pentru stocare de hidrogen; 3) materiale pentru reactoare nucleare de fisiune sau fuziune (în strânsă relație cu proiectul ITER) 4) (bio) senzori pentru monitorizarea poluării, inclusiv pentru prevenirea utilizării în exces a pesticidelor și ierbicidelor (aici se poate face legătura și cu domeniul de specializare inteligentă intitulat BIOECONOMIE)

- **SĂNĂTATE**

Există expertiza și intenția fermă de a continua dezvoltarea cercetărilor în domeniul materialelor biocompatibile, al nanomaterialelor utilizate în livrarea controlată a medicamentelor, precum și în dezvoltarea de materiale pentru senzori cu aplicații în medicină. Cercetările dezvoltate în institut acoperă componente importante din domeniul materialelor cu aplicații în sănătate, incluzând dezvoltarea de materiale biocompatibile și de metode de fabricare a acestora pentru implanturi și proteze, materiale micro și nanostructurate pentru pansamente inteligente, materiale pentru biosenzori purtabili folosiți pentru monitorizarea stării de sănătate. Este un domeniu interdisciplinar care, pentru a se dezvolta cu șanse reale de succes în competiții de proiecte, necesită asamblarea unor echipe complexe de fizicieni, ingineri, chimiști, biologi și întărirea colaborărilor cu unități medicale pentru efectuarea testelor specifice.

- **TEHNOLOGII NOI ȘI EMERGENTE**

INCDFM va contribui, în strânsă relație cu participarea României, la unele mari proiecte de infrastructură care se dezvoltă în prezent atât în țară cât și în alte regiuni ale Europei. Exemplul cel mai

la îndemână îl constituie proiectul ELI-NP, la care INCDFM va contribui cu cercetări privind obținerea unor materiale pentru acoperiri optice rezistente la fluxuri intense de radiație laser, sau la realizarea de ținte pentru experimentele avute în vedere în cartea albă a ELI-NP. De asemenea INCDFM va aduce contribuții, prin studii avansate de material sau de dispozitiv, și la dezvoltarea de noi detectori pentru CERN (colaborarea RD50), la elaborarea de noi tehnici de analiză a materialelor utilizând radiația sincrotron (ELETTRA, C-ERIC), sau la efectele pe care le are iradierea cu diferite tipuri de radiație (incluzând radiațiile ionizante) asupra materialelor cu impact tehnologic în diferite sectoare industriale.

• CERCETARE FUNDAMENTALĂ ȘI DE FRONTIERĂ

Este un domeniu prioritar la nivel național care intersectează toate celelalte specializări inteligente sau priorități naționale. Practic, orice cercetare începe cu studii fundamentale, la granița cunoașterii actuale, pentru a înțelege noi fenomene, a dezvolta modele predictive pentru sinteza de noi materiale și structuri, sau pentru a previziona modul în care diferite aplicații răspund la modificări ale stimulilor externi. Cercetarea fundamentală este cea care oferă cunoașterea necesară pentru avansul către aplicații concrete. Și aici INCDFM poate aduce contribuții determinante în înțelegerea fenomenelor fizice la nano-scală, la nivelul suprafețelor (cataliză și foto-cataliză) sau al interfețelor (proprietăți derivate din imparitate de sarcină la interfețe, inginerie de stres mecanic, etc.), precum și la înțelegerea interacției dintre materia sub diferite forme, în special solidă, și diferite forme de radiații sau constrângeri de mediu (temperaturi foarte ridicate sau foarte joase, presiuni mari sau mici).

INCDFM poate aduce contribuții și la specializările inteligente BIOECONOMIE (dezvoltarea de materiale pentru ambalarea produselor, teste de calitate, bio-senzori, etc.) și PATRIMONIUL CULTURAL (analize compoziționale, metode nedistructive de datare, etc.)

În afară de contribuția esențială la implementarea Strategiei Naționale CDI 2014-2020, Programul Nucleu poate aduce contribuții importante și la alte strategii sau programe naționale sau internaționale, după cum urmează:

(a) Strategia națională pentru competitivitate 2014 – 2020, prin elaborarea de noi concepte, identificarea și studierea de noi fenomene, culminând cu proiectarea de materiale și structuri funcționale cu potențial de aplicare în industrii cu valoare adăugată ridicată, cum ar fi electronică, energetică, transporturi (auto, feroviare, aeronautică), echipamente medicale, sisteme de securitate, aplicații spațiale sau militare, etc.

(b) Strategia Regională de Inovare București-Ilfov. Această regiune este singura euro-regiune dezvoltată din România, cu un PIB/locuitor situat la 131 % din media UE (comunicat Agerpres, 9 decembrie 2015), depășind alte capitale din Europa dezvoltată, cum ar fi Berlin sau Madrid. În regiunea București-Ilfov sunt localizate majoritatea firmelor ITC de renume, precum și multe din companiile producătoare de componente electronice/optoelectronice, senzori, automatizări, echipamente de transport. Constituie un cert avantaj pentru integrarea activității CDI cu activitatea industrială de înaltă tehnicitate faptul că INCDFM se află localizat în această regiune, împreună cu tendința afirmată în mod repetat de autorități de a crea la Măgurele un pol european de înaltă tehnologie, după modelele Adlershof, Jülich sau Karlsruhe (Germania), Orsay-Saclay-Palaisseau sau Villeurbaine (Franța), Tor Vergata – Frascati (Italia) sau Cantoblanco (Madrid). În acest context INCDFM este partener în proiectul Măgurele Science Park dezvoltat de autoritățile locale și județene în această regiune.

(c) Strategiile Regionale de Inovare Sud-Muntenia și Sud-Oltenia. O parte din rezultatele obținute în cadrul cercetării din INCDFM au aplicativitate în industria auto, ori în aceste regiuni se află localizate companiile Dacia-Renault, cel mai mare producător auto din țară, precum și Ford Craiova, companie care se presupune că va trebui să-și susțină un program CDI ambițios pentru a ține pasul cu principalul competitor la nivel național.

(d) Strategia națională pentru dezvoltare regională 2014 – 2020. În afara faptului că INCDM are șansa de a fi situat într-una din cele mai dezvoltate regiuni ale Europei, legatura cu actorii economici din zone mai puțin dezvoltate nu este deloc de neglijat, întrucât noi domenii emergente cu valoare adăugată ridicată pot fi dezvoltate începând cu aceste regiuni. Prin dezvoltarea de materiale inteligente cu aplicativitate în domenii dintre cele mai variate, programul Nucleu produce rezultate de interes pentru IMM-uri din toată țara, inclusiv prin punerea la dispoziție de instrumente de diagnoză în domeniul forestier, minier, turistic sau al agriculturii (senzori de umiditate, detecție de nivel de poluare, diagnoza cladirilor etc.).

(e) Strategii/planuri de mobilitate urbană. Rezultatele cercetărilor din INCDFM pot contribui la dezvoltarea unor elemente de automatizare, monitorizare și control a traficului urban, precum și de monitorizare a noxelor rezultate din traficul auto. Se au în vedere și aplicații utile în mobilitatea electrică (baterii, acumulatori, noi surse de generare nepoluantă a energiei). De asemenea, noi concepte de diagnoză a microfisurilor din carosabil sau a proceselor de îmbătrânire în materialele folosite pentru căile de transport pot conduce la un mod mai economic de selectare a acestor materiale și o creștere a duratei de operare.

(f) Orașul inteligent. Conceptul de „Oraș Inteligent” presupune un înalt grad de monitorizare a diferiților parametri specifici unei aglomerări urbane, cu interconectări și automatizări care necesită senzori, electronică, comunicații. În cadrul programului se vor dezvolta materiale cu aplicativitate în acest domeniu, cu precădere monitorizare noxe, condiții de iluminat stradal inteligent, condiții de trafic, îmbunătățirea eficienței energetice a clădirilor, ecranarea termică a clădirilor cuplată cu generatori solari, etc. De menționat, de asemenea, că modele teoretice de transport pe rețea (în care INCDFM are o certă expertiză) își pot găsi aplicabilitate în elaborarea de concepte pentru optimizarea traficului în marile aglomerări urbane (de exemplu, decalarea programelor de lucru în diverse întreprinderi sau școli pentru evitarea ambuteiajelor, programarea lucrărilor de reabilitare, organizarea de manifestări urbane etc.).

(g) Strategia energetică a României. Se vor dezvolta materiale utile în producerea nepoluantă de energie (conversie fotovoltaică, generatori eolieni, fuziune nucleară-ITER), precum și pentru stocarea energiei (super-capacitori și baterii).

(h) Strategia pentru dezvoltarea sectorului agroalimentar pe termen mediu și lung orizont 2020-2030. Aceste aspecte s-au discutat și la punctul (d). Vor fi dezvoltate materiale inteligente pentru combaterea dăunătorilor, raționalizând în acest fel consumul de pesticide și ierbicide, ceea ce va contribui la producția de alimente ecologice; materiale pentru diferite tipuri de senzori ce monitorizează calitatea produselor; senzori pentru monitorizarea și prevenirea poluării, senzori de presiune, umiditate, temperatură, compoziție atmosferică. De exemplu, în anul 2015, România s-a clasat pe locul 4 în lume privind exportul de vinuri; este de netăgăduit rolul pe care l-ar putea avea metodele avansate de investigații compoziționale și moleculare din INCDFM în standardizarea unor metode de selecție și de certificare a acestor produse.

(i) Strategia Națională de Sănătate 2014-2020. Obiectivele INCDFM sunt bine încadrate în Strategia Națională de Sănătate (SNS), în principal prin producerea de materiale și senzori pentru reducerea morbidității și mortalității bolilor transmisibile și netransmisibile, a impactului asupra indivizilor și societății. Acordarea accesului echitabil la serviciile de sănătate, de bună calitate și un bun raport cost-calitate este un alt obiectiv al SNS la care INCDFM, prin promovarea de prototipuri de instrumente de diagnoză de bună calitate și de cost redus, ar putea contribui, contribuind totodată la reducerea importurilor din acest domeniu mare consumator de resurse financiare ale statului. Senzorii portabili, care să monitorizeze continuu parametri legați de starea de sănătate, în special pentru categoriile expuse cum ar fi bătrâni sau bolnavi cronici, pot duce atât la scăderea cheltuielilor de sănătate dar și la creșterea standardului de calitate a vieții.

(j) Planul Național de Cercetare-Dezvoltare și Inovare PN III. În legătură cu aceasta, trebuie menționat că o cercetare prealabilă, de preferință în cadrul unei Etape a Programului Nucleu, este o condiție *sine qua non* pentru conceperea unui proiect PN III de bună calitate. Nu este suficientă cercetarea bibliografică pentru a se identifica stadiul problemei la nivel național și internațional; din nefericire, experiența a arătat că în multe cazuri nu ne putem baza în exclusivitate pe raportări preliminare, chiar și ale unor grupuri recunoscute sau publicate în reviste foarte serioase. De multe ori, antamarea experimentelor oferă surprize fie și numai în a reproduce rezultate raportate în lucrări din fluxul interațional de cunoștințe. Este de dorit ca orice proiect PN III, în special acelea de tip Parteneriat sau PCCF, să aibă la bază un minim set de investigații preliminare, realizate cu mijloacele institutului, pentru a se testa în ce mod aceste cercetări pot fi continuate cu succes maxim spre implementarea de aplicații.

(k) Facilitatea europeană ELI-NP. Se anticipează că INCDFM va fi principala organizație de cercetare apelată să ofere soluții la problemele legate de materiale pentru laser, optică, caracterizarea componentelor supuse fluxurilor mari de iradiere, aplicații în domeniul dezvoltării de metode pentru studiul suprafețelor, problematica țintelor ultrasubțiri suto-suportate etc.

(l) Strategia Națională pentru Dezvoltare Durabilă a României Orizonturi 2013-2020-2030. Materialele inteligente care pot fi utilizate pentru protecția mediului reprezintă o parte importantă a proiectului propus, fie că este vorba de senzori specifici pentru monitorizare și metode de detecție dedicate, fie că este vorba de tehnologii catalitice-fotocatalitice de îndepărtare a poluanților din aer, apă și sol. Problematicile menționate la punctul (d) se aplică și în relație cu această Strategie.

(m) Rezoluția de admitere a României ca membru cu drepturi depline în Organizația Europeană pentru Cercetare Nucleară (18 iunie 2015). Asocierea României la CERN va oferi noi oportunități de dezvoltare de tehnologii emergente pentru detectori de radiație, senzori de temperatură / presiune / umiditate / câmp magnetic pentru circuitele de siguranță etc. Vezi și punctul următor.

(n) RD50 - Radiation hard semiconductor devices for very high luminosity colliders. Aceasta este o colaborare de lungă durată a INCDFM cu CERN, începută cu mult înaintea admiterii României ca membru cu drepturi depline a CERN, institutul coordonând în prezent una din direcțiile de cercetare (Defect / Material characterization). Creează premise serioase pentru implementarea la CERN de soluții și concepte dezvoltate în INCDFM.

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

(p) Programului Horizon 2020. Una dintre prioritățile INCDFM trebuie să fie și participarea la proiecte internaționale. În special prin viitoarele Programe Nucleu se pot genera rezultate la un nivel de la care se pot iniția propuneri de proiecte cu șanse de succes în competițiile Europene. Se au în vedere în primul rând proiecte de tip ERA-Chair (o propunere va fi depusă chiar la call-ul actual) sau Teaming, dar și alte tipuri de proiecte (ERC, FET, proiecte conduse de IMM, etc.).

(q) În sfârșit, din nefericire, contextul geopolitic actual, precum și situarea României, din punct de vedere geografic, la periferia Uniunii Europene și în apropierea zonelor de conflict (Orientul Mijlociu și Ucraina) impun noi paradigme de securitate, indiferent dacă este vorba de neutralizarea substanțelor toxice, detecția contaminanților de orice natură, monitorizarea traficului fraudulos (de exemplu, detectori de infraroșu ultrasensibili) sau chiar aplicații militare, în domeniul rachetelor sau apărării antiaeriene. În trecut, INCDFM a avut colaborări intense în domeniul aplicațiilor militare și este posibil

ca aceste activități să fie reluate, în măsura în care industria militară autohtonă va solicita soluții rapide și fiabile pentru îmbunătățirea stării de siguranță națională. În cadrul institutului a fost dezvoltat un laborator de tip criminalistic în parteneriat cu structuri ale Ministerelor Afacerilor Interne din România și Bulgaria (SIAS și ISU și omologii bulgari) urmând ca pe viitor să fie dezvoltate și proceduri specifice în special legate de amenințările de tip CRBNE.

2. Modul de derulare al programului:

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

În anul 2021 fondurile alocate Programului Nucleu au fost împărțite în două tranșe.

Mai jos sunt prezentate activitățile (fazele) desfășurate în 2021 pe cele două proiecte componente, conform celor două tranșe de finanțare. Sunt trecute și fondurile alocate pentru fiecare fază și rezultatele previzionate.

Nr. Crt.	Cod proiect	Denumirea proiectului /	Valoare proiect /	Termen de încheiere al fazei	Obiective si rezultate estimate
		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 domeniul de inalta tehnologie si stiintele vietii	22,788,385		
1		Faza 48 - Profile asimetrice integrabile pentru emularea ecranării vacanțelor profunde în spectroscopia de fotoelectroni Responsabili: Dr. Adela Nicolaev, Adrian Pena, Dr.Habil.Cristian M. Teodorescu	1,100,000	27.04.2021	Obiective: Propunerea unui model de funcție asimetrică, pozitiv definită și cu integrală finită, pentru modelarea spectrelor de fotoelectroni emise de sistemele metalice. Rezultate estimate: a) Profil de tip Doniach-Šunjić, însă având înlăturate neajunsurile acestuia (regiuni de secțiune eficace negativă, integrală infinită); b) O mai bună semnificație fizică a parametrilor de asimetrie; c) O variantă practică pentru utilizarea în analiza cantitativă a spectrelor XPS, incluzând lărgirea experimentală; d) Implementarea noului profil în coduri de analiză, accesibile utilizatorilor.
2		Faza 49 - Investigarea efectului dopării cu siliciu asupra interacțiunilor spin-spin în nanoparticule de α	1,100,000	27.04.2021	Obiective: Vor fi efectuate studii complexe prin tehnici de rezonanță electronică de spin (RES) și microscopie electronică de înaltă

		– Fe ₂ O ₃ Responsabili: Dr. Mariana Stefan, Dr. Daniela Ghica			rezolutie (HRTEM) asupra unor pulberi nanostructurate de a-Fe₂O₃ utilizate pentru disocierea fotoelectrochimica a apei. Rezultate estimate: Probele de a-Fe₂O₃ dopate cu siliciu cu concentratie nominala in domeniul 0 - 50 at%. Investigatiile HRTEM vor urmari determinarea morfologiei si structurii probelor in functie de concentratia de dopant. Analiza spectrelor RES masurate in multifrecventa si la temperatura variabila va urmari punerea in evidenta a efectului doparii cu Si⁴⁺ asupra interactiunilor spin-spin si a unei eventuale tranzitii de faza la temperaturi joase. Aceste studii vor fi efectuate in cadrul unui proiect CERIC selectionat pe baza de competitie.
3		Faza 50 - Biocompatibilitatea sistemelor pe baza de matrici de nanofire miez – coaja decorate cu argint Responsabili: Dr. T.A. Enache, Dr. A. Costas, Dr. N. Preda.	1,200,000	10.05.2021	Obiectivul principal este de a prepara matrici de nanofire de tip miez-coaja ZnO-CuO decorate cu argint si a testa biocompatibilitatea acestora in prezenta diferitelor linii celulare, pentru aplicatii de tip (bio) senzori electrochimici. Rezultate estimate: -prepararea de matrici de nanofire cu arhitectura miez-coaja ZnO-CuO decorate cu argint utilizand oxidarea termica in aer (miezul de tip nanofir de ZnO) si pulverizarea catodica cu magnetron (coaja de CuO, respectiv nanoparticule de Ag) -caracterizarea structurala, morfologica si electrochimica a matricilor de nanofire -testarea matricilor de nanofire cu arhitectura miez-coaja ZnO-CuO decorate cu argint in linii de cultura celulare.
4		Faza 51 - Sinteza si caracterizarea hidroxiazotatului de zinc, potential fertilizator pentru frunzele plantelor Responsabili: Dr.Daniela Ghica, Dr.Ioana Vlaicu	1,200,000	10.05.2021	Obiectiv: Sinteza si caracterizarea hidroxiazotatului de zinc, potential fertilizator pentru frunzele plantelor Rezultate estimate: Se va sintetiza hidroxiazotat de zinc prin doua metode si se vor caracteriza comparativ proprietatile morfo-structurale si stabilitatea termo-chimica la tratamente termice in aer. Se vor utiliza multiple tehnici de analiza : XRD, TEM, FTIR, RES, DSC. Tranzitia de faza structurala se va pune in evidenta cu precizie mare prin experimente RES pe probe tratate termic in pulsuri, folosind Mn ca sonda

					paramagnetica. S Se va determina metoda optima de obtinere a unui produs cu structura lamelara cu arii cat mai mari si cu o stabilitate termica buna, proprietati care il recomanda pentru a fi un bun fertilizator al frunzelor plantelor. o lucrare stiintifica trimisa spre publicare la un jurnal indexat Web of Science®.
5		Faza 52a - Obținerea si caracterizarea fizico-chimica a nanoparticulelor de oxid de fier functionalizate pentru tratamentul neoplasmelor. Responsabili: Dr. D. Predoi, Dr. S.L. Iconaru; Dr. C. Ciobanu	635,239	10.05.2021	Obiectiv: Obținerea și caracterizarea fizico-chimică și biologică a nanoparticulele de oxid de fier funcționalizate cu aplicații în tratamentul neoplasmelor. Rezultate estimate: Obținerea de nanoparticule de oxid de fier funcționalizate utilizând o metodă de coprecipitare adaptată, cu aplicații în tratamentul neoplasmelor; Studiu morfologic (SEM) și structural (XRD, FTIR) al nanoparticulelor de oxid de fier funcționalizate; Studii de citotoxicitate in vitro; Studii in vivo pe model animal; O lucrare științifică trimisă spre publicare la un jurnal indexat Web of Science®.
6		Faza 53 - Investigarea comparativa a proprietatilor nanostructurilor oxidice de tip 3f-4d procesate diferit: metalurgia pulberilor, respectiv Spark Plasma Sintering (SPS). Responsabili faza: Dr.Cristina Bartha, Dr. Mihai Grigorescu	1,000,000	10.06.2021	Obiectivul fazei: Obținerea structurilor perovskitice de tipul REFeO ₃ (unde RE= Tb ³⁺ , Gd ³⁺ , Dy ³⁺ si Ho ³⁺) prin 2 metode diferite: metoda clasica (metalurgia pulberilor) si Spark Plasma Sintering (SPS), o metoda neconventionala si rapida de procesare si apoi investigarea acestora Rezultate estimate: Realizarea unei analize complexe, comparative a compusilor obtinuti, coreland evolutia proprietatilor si a mecanismelor electronice specifice cu structurile si morfologia acestora

7		Faza 54 - Modularea proprietatilor senzitive ale sistemului $(1-x) \text{SnO}_2 - x \text{NiO}$ prin variatia domeniului de concentratii ($x = 0.0 - 10.0$) si a conditiilor de sinteza hidrotermala (pH si presiune de vapori) Responsabili: Dr. Adelina Stanoiu, Dr. Cristian Eugen Simion	1,100,000	10.06.2021	Obiective: elaborarea de solutii aplicative pentru imbunatatirea selectivitatii senzorilor chemorezistivi prin folosirea unui sistem binar de materiale oxidice semiconductoare, $(1-x) \text{SnO}_2 - x \text{NiO}$. Rezultate estimate: Evaluarea specificitatii morfologice induse de parametrii de sinteza hidrotermala; Validarea in laborator a functionalitatii sistemului prin simularea conditiilor atmosferice si a noxelor potential prezente in teren.
8		Faza 55 - Modele teoretice pentru racirea vibrationala a nanorezonatorilor mecanici in regim cuantic Responsabili: Dr.V. Moldoveanu , Dr.Radu Dragomir	1,000,000	09.07.2021	Obiectiv: Propuneri teoretice pentru scheme de racire vibrationala dinamica pe baza cuplajelor fonon-electron si/sau fonon-foton. Rezultate estimate: i) calculul curentilor de sarcina si de caldura precum si al ocuparii modurilor de vibratie; ii) calculul parametrilor de eficienta relevanti si discutarea diferitelor regimuri ale protocolului cuantic de racire; iii) identificarea efectelor fortei polaronice; iv) investigatii teoretice ale cuplajului spin-fonon in sisteme hibride.
9		Faza 56 - Sticle calcogenice de inalta performanta transparente in domeniul infrarosu pentru vedere nocturna si termoviziune. Responsabil fază: Dr. Florinel Sava	1,100,000	09.08.2021	Obiectiv: Obtinerea de sticle calcogenice cu punct de topire scazut, multi-banda: transparente in spectrul vizibil dar si in banda de transparenta atmosferica II (3-5 μm) si III (8-12 μm). Rezultate estimate: TRL3: Pastile din sticla calcogenica cu fetele slefuite, transparente in infrarosu si vizibil pentru vedere nocturna si termoviziune. O lucrare stiintifica trimisa spre publicare intr-o revista cotate ISI.

10		Faza 57 - Influenta micilor deformari ale structurii cristaline asupra proprietatilor magnetice si semimetalice in compusii Heusler Responsabil: Dr. Ancuta Barsan	1,000,000	09.08.2021	Obiective: Se urmareste analiza efectului micilor deformari (concretizate atat prin modificari unghiulare cat si ale parametrilor de retea) ale structurii cristaline tipice asupra structurii electronice, a proprietatilor semimetalice si a comportamentului magnetic in cazul unor compusi Heusler noi, pentru utilizarea lor potentiala ca materiale componente sub forma de substraturi in heterostructuri epitaxiale. Rezultate estimate: Caracterizarea teoretica a structurii electronice si a proprietatilor magnetice asociate deformatiilor structurii cristaline tipice in aliaje Heusler utilizand ca metoda de investigare Teoria Functionalei de Densitate si compararea rezultatelor cu date experimentale disponibile in literatura.
11		Faza 58 - Dinamica anomala a vortexurilor in monocristale de pnictid dopat isovalent $\text{BaFe}_2(\text{AsxP}_{1-x})_2$ Responsabil: Dr. Adrian Crisan	1,100,000	09.09.2021	Obiective: Investigarea experimentală și teoretică a unor monocristale de pnictid dopat isovalent $\text{BaFe}_2(\text{AsxP}_{1-x})_2$ printr-o serie de investigații la temperaturi joase și câmpuri magnetice intense. Astfel, din măsurătorile de magnetizare DC se vor determina densitățile critice de curent în funcție de temperatura și câmp precum și evoluția SMP. Din măsurătorile de susceptibilitate magnetică în funcție de temperatura, câmpul magnetic DC, câmpul alternativ de excitare și frecvență, precum și din curbele de relaxare magnetică în diverse condiții, se vor obține informații privind diversele regimuri de dinamică a vortexurilor, tipul de creep elastic sau plastic, marimile manunchiurilor de vortexuri și influența centrilor pinning. Rezultate estimate: Din rezultatele măsurătorilor menționate și din analizarea teoretică a datelor experimentale se vor determina caracteristicile principale ale sistemului de vortexuri în aceste materiale, dinamica lor în diverse condiții și în relația cu centri pinning. Se așteaptă elaborarea unui model teoretic plauzibil care să explice credibil anomaliile observate în studiile preliminare pe unele monocristale din aceeași familie. Se vor obține informații privind posibila

					fructificare a dinamicii anormale a vortexurilor in aplicatii practice.
12		Faza 59 - Metode avansate de cartografiere in spatiul direct si spatiul reciproc la scala nanometrica cu fascicul de electroni Responsabil faza: Dr. Corneliu Ghica, Dr. Andrei Cristian Kuncser	1,100,000	09.09.2021	Obiective Implementarea in premiera pe plan national a doua tehnici avansate de caracterizare morfostructurala a materialelor la nivel nanometric cu ajutorul microscopului electronic prin transmisie: tomografia cu fascicul electronic si cartografia structurala cu fascicul electronic in precesie. Rezultate estimate Va fi pusa la punct metodologia de lucru a celor doua tehnici incluzand optimizarea parametrilor de achizitie si a algoritmilor de procesare a datelor. Tomografia electronica va permite obtinerea de informatii morfologice 3D la scala nanometrica a materialelor nanostructurate prin reconstructia tridimensionala a obiectelor microscopice investigate. Tehnica difractiei de electroni cu fascicul in precesie va permite corelarea informatiei structurale si morfologice la scala nanometrica prin cartografiere structurala. Cele doua metode vor fi implemetate prin aplicarea lor in studiul materialelor compozite, ceramicilor si aliajelor folosite pentru senzori de gaze, bariere termice, etc
13		Faza 60 - Dinamica moleculara a unor sisteme anizotrope de tip cristal lichid termotrop, in compozite cu semiconductori oxidici sintetizati prin metode ecologice Responsabili: Dr. Irina Zgura; Dr. Paul Ganea	1,000,000	11.10.2021	Obiectiv: obtinerea de cunostinte despre tipuri de sisteme moleculare anizotrope-cristale lichide discotice si compozite ale acestora cu semiconductori oxidici sintetizati prin metode ecologice Rezultate estimate: : i) Obtinerea semiconductoarelor oxidice prin metode ecologice de sinteza ; ii) Caracterizarea complexa din punct de vedere structural, morfologic, stabilitate termica, incarcarea compozitelor, optic si al proprietatilor electrice/dielectrice; iii) Spectrele marimilor fizice de material, permitivitatea dielectrica, conductivitatea electrica, pentru diferite temperaturi, obtinute prin SD; Stabilirea corelatiei intre conditiile de preparare a probei (concentratia de dopare) si proprietatile electrice/dielectrice; iv) Seturi de parametri de fitare conform modelelor de dinamica moleculara specifice cristalelor lichide si conform unor/noi modele pentru compozite; Prin

					fitarea datelor cu functiile model se pot separa diferitele procese de relaxare si se obtin, printre altele, timpai caracteristici de relaxare dielectrica, energiile de activare, temperaturile tranzitiilor de faza.
14		Faza 61 - Procese fotocatalitice si hipertermie magnetica in microemulsii inverse Responsabil faza: Dr. Traian Popescu, Dr. Arpad Rostas, Dr. Nicusor Iacob	1,000,000	11.11.2021	Obiective: 1. Studiul reducerii fotocatalitice pe suprafata nanoparticulelor de TiO₂, in interiorul fazei dispersate a unor microemulsii inverse (a/u), a sarurilor de tetrazoliu MTT si MTS, utilizate ca indicatori in teste de viabilitate celulara in vitro 2. Studiul incalzirii unor ferrofluide pe baza de Fe₃O₄/γ-Fe₂O₃ ce constituie faza dispersata a unor microemulsii inverse expuse la campuri magnetice alternative externe Rezultate estimate: 1. Obtinerea de nanoparticule de TiO₂ cu structuri si activitati fotocatalitice diferite, prin hidroliza alcozilor de titan (TTIP si TBT) urmata de tratament termic/hidrotermal al precipitatelor rezultate 2. Obtinerea de microemulsii inverse (a/u), in care faza dispersata este constituita din suspensii apoase de TiO₂ sau Fe₃O₄/γ-Fe₂O₃ 3. Estimarea eficientei reactiilor de reducere fotocatalitica sub iradiere UV a sarurilor de MTT si MTS dizolvate in faza dispersata 4. Determinarea si analiza curbelor de incalzire in cazul fazei dispersate magnetice expusa la campuri magnetice alternative Livrabile: Redactarea partiala a unui manuscris de articol stiintific pe baza rezultatelor obtinute in studiile desfasurate
15		Faza 62 - Proprietatile optice ale compozitelor poli difenil amina si fosforena Responsabil: Dr. Mihaela Baibarac	1,000,000	11.11.2021	Obiective: evidentiarea proprietatilor optice al compozitului bazat pe poli difenil amina (PDPA) si fosforena (P). Rezultate estimate: i) studii corelate de spectroscopie Raman si FTIR in vederea ilustrarii proprietatilor vibrationale ale compozitului PDPA/P sintetizat electrochimic; ii) procese fotochimice evidentiare prin fotoluminescenta (PL); iii) evaluarea unghiului de orientare a PDPA pe straturile de P prin studii de anizotropie a PL.

16		Faza 63 - Creșterea durabilității celulelor solare perovskite hibride prin încapsulare Responsabil: Dr. Lucia Leonat	1,200,000	09.12.2021	Obiectiv: În aceste celule solare perovskite hibride, mecanismele principale de degradare sunt cauzate în special de umiditate, temperatura și oxigen, ducând la degradarea rapidă a stratului fotoactiv și a electrodului metalic superior. Scopul studiului este investigarea unor proceduri de încapsulare robuste și cât mai puțin costisitoare pentru a stabiliza și a prelungi durata de funcționare pentru celulele solare perovskite realizate în laborator. Rezultate estimate, se vor studia atât stabilitatea intrinsecă, legată de materialele folosite pentru etanșare, cât și stabilitatea extrinsecă reflectată în gradul de deteriorare al celulelor solare afectate de procedura de încapsulare.
17		Faza 64 Metode termice și magnetice în optimizarea procesării de aliaje feritice nanostructurate consolidate prin dispersie de oxizi (ODS) responsabil: Dr. Valentina Mihalache	888,385	11.11.2021	Obiective: Obținerea de aliaje Fe14Cr ODS nanostructurate prin aliere mecanică. Rezultate estimate: Evidențierea proceselor activate termic provocate de prezenta impurităților (carbon, oxigen, azot) prin analiză termică și spectrometrie de masă. Evidențierea modificărilor microstructurale provocate de impurități (carbon, oxigen, azot) cu ajutorul măsurătorilor magnetice. Se vor propune procesări de oțeluri feritice ODS cu proprietăți optimizate (în particular pentru eliminarea impurităților) pentru aplicații în condiții extreme
18		Faza 65 Calculul funcțiilor de undă quasi-particula relevante în microscopia STM pe nano-structuri. Responsabil: Dr. Mugurel Tolea	1,100,000	11.11.2021	Obiective: Dezvoltarea formalismelor existente în literatura prin considerarea tunelărilor posibile pe stări excitate. Evidențierea rolului corelațiilor electronice în distribuția spațială a funcțiilor de undă Quasi-Particula. Rezultate estimate: i) Calcule de spectrale multi-electronice pentru diverse nano-structuri de interes: doturi cuantice de grafena, inele poligonale de tip miez/coajă și/sau diverse molecule. ii) Calculul funcțiilor de undă quasi-particula, a căror distribuție spațială este proporțională cu semnalul STM, pornind de la spectrele many-body calculate anterior.

19		Faza 52b Studii biologice si de stabilitate ale nanoparticulelor de oxid de fier functionalizate cu aplicatii in tratamentul neoplasmelor Responsabili: Dr. D. Predoi, Dr. S.L. Iconaru, C. Ciobanu	564,761	09.12.2021	Obiectiv: Obținerea și caracterizarea fizico-chimică și biologică a nanoparticulele de oxid de fier funcționalizate cu aplicații în tratamentul neoplasmelor. Rezultate estimate: Obținerea de nanoparticule de oxid de fier funcționalizate utilizând o metodă de coprecipitare adaptată, cu aplicații în tratamentul neoplasmelor; Studiu morfologic (SEM) și structural (XRD, FTIR) al nanoparticulelor de oxid de fier funcționalizate; Studii de citotoxicitate in vitro; Studii in vivo pe model animal; O lucrare științifică trimisă spre publicare la un jurnal indexat Web of Science®.
20		faza 66 Studiul proprietatilor piroelectrice în structuri feroelectrice epitaxiale fara plumb Responsabil: Dr. Mihaela Botea	1,200,000	09.12.2021	Obiectivul fazei:Proiectul vizeaza studiul proprietatilor piroelectrice in structuri feroelectrice fara plumb, care contin filme epitaxiale realizate prin ablatie laser pe diferite substraturi, cu scopul utilizarii acestora in senzori piroelectrici, in locul celor care contin plumb . Raspunsul pioelectric este legat de proprietatile intrinseci ale materialului piroelectric folosit, dar si de proprietatile termice ale substratului. Se va urmari maximizarea raspunsului piroelectric prin realizarea unor filme subtiri de calitate buna, prin utilizarea unor contacte metalice adecvate, dar si prin valorificarea anumitor contributii extrinseci, ca de exemplu a celor piezoelectrice, la valoarea totala a semnalului. Rezultate estimate: Se vor face masuratori de semnal piroelectric, in modul de lucru tensiune, ale structurilor bazate pe feroelectrici fara plumb, cu scopul de a fi folosite ca elemente active in detectori piroelectrici. In cazul acestor tipuri de structuri, se vor urmari: - corelarea proprietatilor structurale, electrice si piroelectrice; - intelegerea influentei curentilor de scurgere si a pierderilor prin conductie asupra semnalului piroelectric, prin optimizarea interfetelor si a contactelor metalice utilizate; - stabilirea rolului contributiilor extrinseci la semnalul piroelectric, de

					exemplu a celor piezoelectrice, generate de stress sau de incalzirea neuniforma a structurii.
21		Faza 67 Celule solare pe bază de nanocristale de compuși semiconductori. Responsabili: Dr. C.C. Negrilă, C. Logofatu	1,100,000	09.12.2021	Obiectivul fazei constă în obținerea și studiul unor celule solare din generația a treia, în configurație de diodă Schottky, pe bază de straturi de nanocristale de GaAs, CdTe. Rezultate estimate: (a) preparare straturi de nanocristale de compuși semiconductori prin procese chimice și electrochimice sau prin procese fizice-evaporare termică, PLD, sputtering, urmate de tratamente termice; stabilirea metodologiei de obținere de nanocristale de dimensiune și structură dorită în vederea asigurării reproductibilității straturilor; (b) obținerea de structuri de tip ITO/strat NC/metal și studiul proprietăților electro-optice ale acestora; (c) abordarea unor procese de obținere chimice și fizice, măsurători de compoziție a suprafeței (XPS, ARXPS), și de morfologie a suprafeței (STM, AFM, SEM, TEM), măsurători de caracterizare electrică și optică.

22		faza 68 Creșterea stabilității celulelor prin încapsularea stratului de perovskit de tip MAPI Responsabil: Dr. Mihaela Florea	1,100,000	09.12.2021	Obiectiv: Performanța celulelor solare perovskitice a crescut cu o viteză fără precedent, iar în acest moment eficiența acestora depășește 20%. În prezent, stabilitatea slabă a celulelor solare perovskitice reprezintă o barieră pentru comercializarea lor. În particular, umiditatea, temperaturile ridicate și expunerea la radiații UV contribuie la degradarea perovskitului hibrid de tip $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ sau $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3\text{-xClx}$ prin dizolvarea iodurii de metil amoniu pentru a produce PbI_2. Prin urmare, obiectivul acestui studiu este de a realiza încapsularea de tip “core-shell” a stratului perovskitic pentru a preveni degradarea celulelor solare de tip perovskitic. Investigarea relației dintre proprietățile fizico-chimice ale mai multor încapsulanți de tip $\text{CsPbBr}_3/\text{CsPb}_2\text{Br}_5$ și eficiența celulelor solare, precum și capacitatea lor de a îmbunătăți stabilitatea filmelor $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3\text{-xClx}$ va fi studiată în cadrul acestui proiect. Rezultate estimate: Studiul sistematic al condițiilor de încapsulare a stratului perovskitic, prin varierea diferiților parametri de sinteză: concentrație, temperatură, solvent, raportul dintre reactanți, adăugarea de surfactanți; Caracterizarea straturilor încapsulate prin diferite tehnici: TG-DTA, XRD, XPS, UV-VIS, proprietăți fotovoltaice; Determinarea stabilității termice a stratului perovskitic încapsulat.
	PN19-030102	Dezvoltarea de metode teoretice si numerice avansate si de programe de formare profesionala pentru investigarea unor procese din fizica si domenii conexe	278,505		
1		Faza 5a- Formalisme de transport in sisteme cu dimensionalitate redusa Responsabili: Dr. Valeriu Moldoveanu, Dr. M. Tolea	91,500	31.08.2021	Prezentare introductiva a fenomenelor de transport in regim mezosopic ca o problema de sisteme cuantice deschise in interactie - Prezentarea formalismului Landauer-Buttiker (deducere, discutie a regimului de valabilitate); Prezentarea metodei ecuației master (deducere pentru sisteme in interactie in regim non-markovian); Prezentarea unor metode de calcul pentru stările multiparticulate si pentru descrierea efectelor de

					interactie in sisteme cu dimensionalitate redusa.
2		Faza 6a : Obținerea timpului de viața a muonului sub acțiunea unui laser de mare putere Responsabil : Dr. Sabin Stoica	91,500	09.12.2021	Deducerea formulei de viața cu includerea interacției laser
3		Faza 5b. Aplicații ale metodelor teoretice pentru descrierea fenomenelor de transport - partea 1 Responsabili Dr. V. Moldoveanu; Dr. M.Tolea	47,752	09.12.2021	Studiul efectelor de interacție asupra proprietăților de transport în doturi cuantice (blocaja Coulombiană, diagrama de stabilitate, efecte de 'sensing') - Descrierea transportului tranzitoriu și a dinamicii stărilor excitate - Introducere în transportul cuantic în sisteme active optice - Prezentarea unor fenomene noi în sisteme nanoelectromecanice (regim de transport vibronic) - Descrierea unor fenomene de interferență cuantică și/sau a unor efecte de corelație în sisteme cu dimensionalitate redusă.
4		Faza 6b : Dezvoltarea unor coduri numerice și calculul timpului de viața al muonului în prezența unui câmp laser - partea 1 Responsabil: Dr. Sabin Stoica	47,753	09.12.2021	calculul timpului de viața al muonului în prezența unui câmp laser monocromatic
Total program:			23,066,890		

2.2. **Proiecte contractate:**

Cod obiectiv	Nr. proiecte contractate	Nr. proiecte finalizate	Anul 2021
PN19-030101	2	0	22,788,385
PN19-030102			278,505
Total:	2	0	23,066,890

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

	Anul 2021
I. Cheltuieli directe	12,441,679.17
1. Cheltuieli de personal	10,777,277.00
2. Cheltuieli materiale și servicii	1,664,402.17
II. Cheltuieli Indirecte: Regia	9,509,613.00
III. Achiziții / Dotări independente din care:	1,115,597.83

1. pentru construcție/modernizare infrastructura	
TOTAL (I+II+III)	23,066,890.00

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 documentații 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**
- Instituții 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: electronică; auto; IT; securitate; energetică; echipamente și automatizări; medicină; protecția mediului)
- Prezentări la conferințe: **300**

Indicator	Valoare asumată la final Program Nucleu (2022)	Valoare realizată în 2019 (primul an)	Valoare realizată în 2020 (al doilea an)	Valoare realizată în 2021 (al treilea an)	Grad de realizare (%)	Observații/Detaileri
Studii și documentații pentru noi tehnologii, echipamente și metode	4	2	3	3	200	Fazele 12, 17 și 20 din planul de realizare
Formule, rețete, scheme, produse și tehnologii (la nivel de material, tehnologie sau demonstrator produs în laborator)	30	9	9	12	100	Fazele 2, 3, 4, 5, 9, 14, 15, 16, 19, 21, 22 la proiectul 1 și 4 (6b) din proiectul 2 din planul de realizare
Lucrări publicate în jurnale ISI	500	180	167	187	107	Se menține o medie de publicații ISI în jur de 170-180, înregistrările ISI se fac însă până în martie anul următor, deci numărul va fi mai mare.
Cereri de brevet depuse	30	21	20	28	230	Unul din brevete este UPTO, 9 brevete acordate în 2020
Aplicații de proiecte	25	159	51	153	1452	Au fost depuse 26 proiecte PCE, 13 PD, 69 PED, 7 PTE, 24, TE, 1 Sectorial,

						1 PFE, 1 Quantera, 6 M_ERA NET, 3 H2020 si 1 ERC Starting Grant.
Tineri cercetători angajați în institut	10	6	13	9	280	Dintre noii angajați, 4 sunt din Maroc, care se adaugă unor cercetători din Franța, Portugalia, Mauritania care lucrează deja în INCDFM de câțiva ani.
Instituții colaboratoare din țară și străinătate	30	42	70	70	607	64 instituții colaboratoare sunt numai în colaborarea RD50-CERN, în care INCDFM coordonează unul din pachetele de lucru.
Cercetători din străinătate care vin pentru stagii de lucru în INCDFM	10	12	8	11	310	3-Bursieri AUF; 1 angajat CS2, 1 angajat CS; 7 angajati ACS.
Firme contactate pentru valorificarea rezultatelor	30	17	5	8	100	Sunt 6 firme din tara (Apel Laser, All Green, Swarm, Zentiva, Inter Electro, Exatel) si 2 din strainatate (Islanda) care au manifestat interes sau cu care s-au incheiat contracte.
Prezentări la conferințe	300	161	30	105	98.7	Anul 2021 a continuat sa fie marcat de criza COVID-19, existand inca multe restrictii de circulatie sau privind organizarea de evenimente stiintifice. Cu toate acestea, participarea la conferinte a fost semnificativ mai mare fata de 2020, datorita faptului ca multe evenimente au fost organizate on-line sau in sistem hibrid.

Se poate constata că indicatorii asumați în propunerea de Program Nucleu transmisă la competiția organizată la începutul anului 2019 au un grad de îndeplinire de cel puțin 80 %, în condițiile în care actualul Program Nucleu se întinde pe 4 ani, până la finalul anului 2022.

Remarcabil este faptul că unii indicatori au fost consistent depășiți încă din primul an, cum ar fi „Aplicații de proiecte”, „Instituții colaboratoare din țară și străinătate”, „Cercetători din străinătate care vin pentru stagii de lucru în INCDFM”, „Cereri de brevete” sau „Tineri angajați în institut”. Printre cauzele care au dus la această situație putem enumera următoarele:

- Competițiile de proiecte organizate în anii 2019-2020, după o pauză de 3 ani. Această lipsă de competiții a dus la depunerea unui număr foarte mare de proiecte, în special la PED, PD, TE, PTE și PCE (dar și la alte competiții naționale sau internaționale) pentru a se putea asigura o finanțare cât de cât decentă în anii următori.

- Proiectele de tip colaborativ cu firme au dus la contactarea unui număr mare de companii pentru a se analiza posibile colaborări în vederea valorificării rezultatelor obținute în cadrul Programelor Nucleu anterioare, sau al Programului Nucleu actual. Merită menționat faptul că Programul Nucleu este considerat ca un „incubator” pentru noi idei, inclusiv demonstrarea validității lor în sistem „proof of concept”. Multe dintre soluțiile tehnice propuse firmelor care au depus expresii de interes pentru proiecte de tip POC-G își au originea în cercetările efectuate în cadrul Programului Nucleu. Ca urmare, încheierea de contracte subsidiare Poc-G poate fi privită ca o modalitate de valorificare a rezultatelor obținute în cadrul Nucleului, contractele finanțând transferul efectiv de cunoaștere de la INCDFM către firmele partenere, cu scopul declarat de a pune în piață noi produse și tehnologii.

- Infrastructura de cercetare variată și modernă atrage un număr din ce în ce mai mare de tineri din țări mai puțin dezvoltate pentru a veni să desfășoare stagii experimentale de practică în INCDFM, mergând până la a se înscrie la doctorat în țară.

Mai menționăm că rezultatele prezentate mai sus au fost obținute în condițiile în care finanțarea pentru anii 2019-2021 a fost sub cea solicitată prin propunerea transmisă la competiție. Mai mult, finanțarea în 2021 a fost mai mică decât în 2019, deși suma cuvenită conform veniturilor realizate în cei 3 ani anteriori este consistent mai mare.

O altă mențiune trebuie făcută în legătură cu anul 2021, când activitatea experimentală a fost grav afectată de restricțiile impuse datorită crizei COVID-19. Restricțiile de circulație, carantinarea, au dus nu numai la anularea multor evenimente științifice, dar și la anularea unor stagii de lucru la infrastructuri experimentale din străinătate (ex. la sincrotrone). În plus, necesitatea evitării aglomerațiilor a dus la eșalonarea experimentelor și a accesului la anumite echipamente, ceea ce a dus la unele întârzieri în acumularea datelor necesare redactării de noi publicații și cereri de brevet de invenție.

4. **Prezentarea rezultatelor:**

4.1. **Stadiul de implementare al proiectelor componente**

Denumirea proiectului	Tipul rezultatului estimat	Stadiul realizării proiectului
1. Cercetări teoretice și experimentale la frontiera cunoașterii în fizica stării condensate și al materialelor multifuncționale cu impact aplicativ în domenii de înalta tehnologie și științele vieții	(studiu proiect, prototip, tehnolog, etc., alte rezultate) 9 studii; 12 formule, rețete, materiale; 17 tehnologii și produse 187 lucrări publicate în jurnale indexate ISI și alte lucrări publicate în alte publicații; 27 cereri de brevet și modele de utilitate.	În grafic, grad de realizare estimat 80 %
2. Dezvoltarea de metode teoretice și numerice	1 tutoriale; 2 lucrări ISI	În grafic, grad de realizare estimat 80 %

În continuare sunt prezentate, în rezumat, principalele rezultate obținute la fiecare fază/etapă de realizare din schema de mai sus.

Titlu Fază: Profile asimetrice integrabile pentru emularea ecranării vacanțelor profunde în spectroscopia de fotoelectroni

Termen: 27.04.2021

Obiective: Propunerea unui model de funcție asimetrică, pozitiv definită și cu integrală finită, pentru modelarea spectrelor de fotoelectroni emise de sistemele metalice.

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

În studiul de față, se propune un profil de linie asimetric pentru analiza spectrelor XPS care să satisfacă următoarele cerințe: (i) să fie integrabil, astfel încât să permită analiza compozițională a probelor; (ii) să nu prezinte zone “nefizice” (de exemplu, de secțiuni eficace negative); (iii) toți parametrii să aibă semnificație fizică imediată; (iv) teoria care stă la baza acestui profil să fie ușor de înțeles și pentru experimenatori – și, nu în ultimul rând, (v) să funcționeze, adică acest profil va fi testat pe sisteme-model.

Se pornește de la ideea că într-un solid metalic are loc un fenomen de relaxare, de ecranare a vacanței profunde, care intervine după un interval τ_0 de la producerea fenomenului de fotoemisie la nivel atomic. S-a adaptat teoria standard a interacțiunii radiației electromagnetice cu materia, descrisă în detaliu în Raportul extins. Energiile totale ale fotoelectronului înaintea ecranării și după aceea vor fi ușor diferite, de regulă energia după ecranare va fi mai ridicată decât înainte. Cu alte cuvinte, vom pune:

$$(\omega_{ba} - \omega)(t) = \begin{cases} \omega_1, & \text{pentru } t < \tau_0 \\ \omega_2, & \text{pentru } t \geq \tau_0 \end{cases} \quad (1)$$

Se transcrie ecuația care dă coeficientul de tranziție în starea b , cu dependența din (1):

$$\dot{c}_b^{(1)}(t) = M_{ba} e^{i(\omega_{ba} - \omega)(t) \cdot t - t/\tau} \quad (2)$$

(pentru notații, vezi Raportul extins) iar aceasta se integrează, rezultând, pentru $t \geq \tau_0$:

$$\begin{aligned} c_b^{(1)}(t) &= M_{ba} \left\{ \int_0^{\tau_0} e^{(i\omega_1 - \frac{1}{\tau})t'} dt' + \int_{\tau_0}^t e^{(i\omega_2 - \frac{1}{\tau})t'} dt' \right\} \\ &= M_{ba} \left\{ \frac{e^{(i\omega_1 - \frac{1}{\tau})\tau_0} - 1}{i\omega_1 - \frac{1}{\tau}} + \frac{e^{(i\omega_2 - \frac{1}{\tau})t} - e^{(i\omega_2 - \frac{1}{\tau})\tau_0}}{i\omega_2 - \frac{1}{\tau}} \right\} \end{aligned} \quad (3)$$

În continuare, prin analogie cu teoria standard a interacțiunii cu radiația electromagnetică, se calculează amplitudinea de tranziție după un timp infinit de la momentul excitării:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} |c_b^{(1)}(t)|^2 = |M_{ba}|^2 \left\{ \frac{e^{(i\omega_1 - \frac{1}{\tau})\tau_0} - 1}{i\omega_1 - \frac{1}{\tau}} - \frac{e^{(i\omega_2 - \frac{1}{\tau})\tau_0}}{i\omega_2 - \frac{1}{\tau}} \right\} \left\{ \frac{e^{(-i\omega_1 - \frac{1}{\tau})\tau_0} - 1}{-i\omega_1 - \frac{1}{\tau}} - \frac{e^{(-i\omega_2 - \frac{1}{\tau})\tau_0}}{-i\omega_2 - \frac{1}{\tau}} \right\} \quad (4)$$

După ceva calcule algebrice, se obține un profil de linie pe care care depinde de 4 parametri. Poate fi exprimat mai convenabil folosindu-se o singură variabilă care exprimă diferența dintre energia de excitare și energia de tranziție, plus o altă variabilă care exprimă diferența dintre cele două energii ale stării finale $\hbar\Delta\omega = \hbar\omega_2 - \hbar\omega_1 = \hbar\omega_b^{(2)} - \hbar\omega_b^{(1)} \equiv \delta$, plus cele două intervale temporale τ, τ_0 . Prin relația lui Heisenberg timp-energie se pot defini lărgimile spectrale $\gamma = \hbar/\tau$ și $\gamma_0 = \hbar/\tau_0$, fie $x = \hbar\omega - \hbar\omega_b^{(1)} \equiv \hbar\omega - \varepsilon_C^{(1)}$ și $\hbar\omega_a = -\varepsilon_B$. Atunci $\hbar\omega_1 = \varepsilon_B - x$ și $\hbar\omega_2 = \varepsilon_B - x + \delta$.

Vom nota și cu $\exp\left(-\frac{\tau_0}{\tau}\right) \equiv \exp\left(-\frac{\gamma}{\gamma_0}\right)$. Profilul asimetric se scrie în aceste condiții ca:

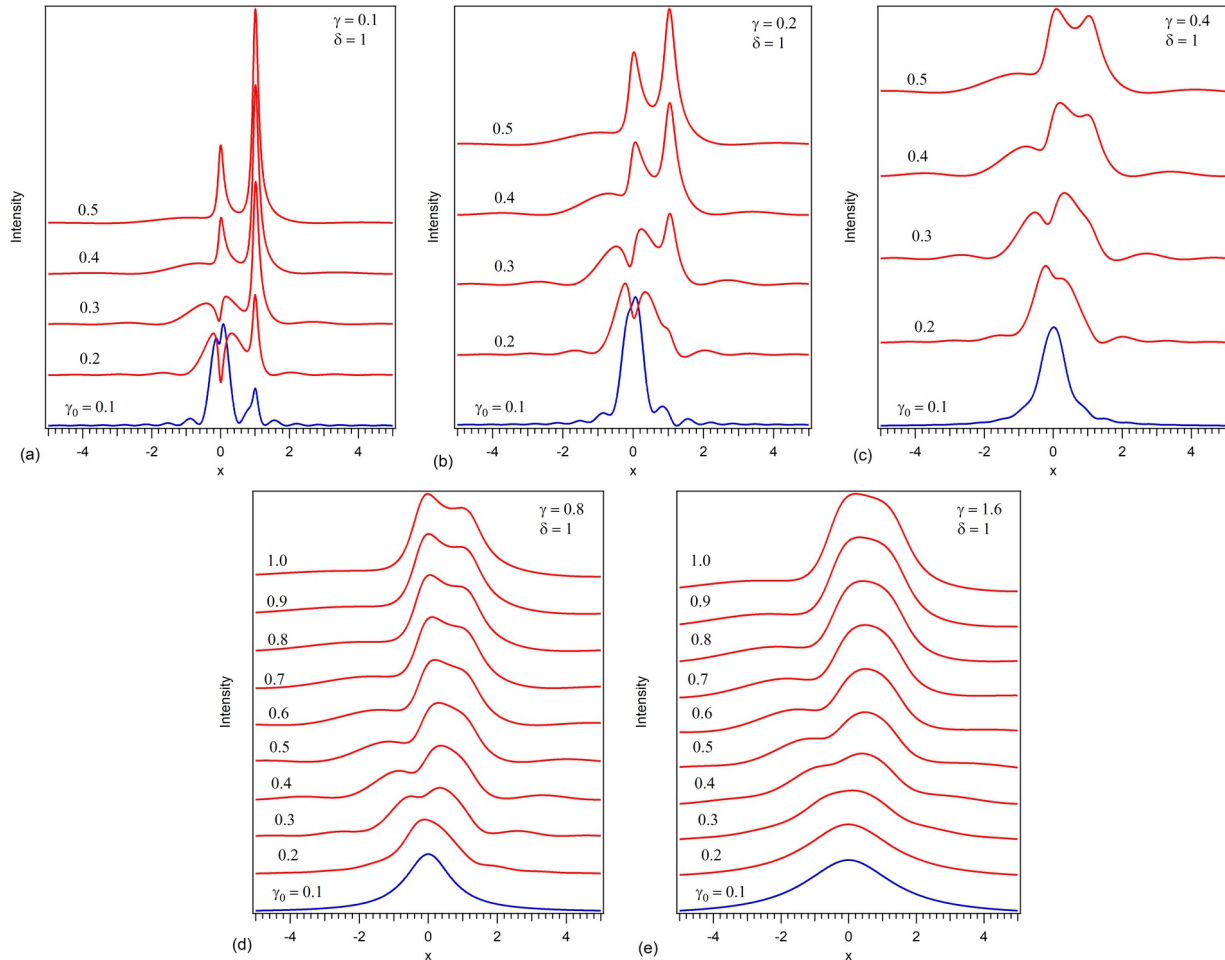


Figura 1. Profile obținute pentru noul model care ia în calcul ecranarea vacanței profunde, pentru diferite valori ale lărgimii Lorentz legată de timpul de viață în raport cu dezexcitarea vacanței profunde γ : 0.1 unități (a), 0.2 unități (b), 0.4 unități (c), 0.8 unități (d), 1.6 unități (e). Pentru fiecare grafic, s-au reprezentat curbe reprezentând mai multe lărgimi asociate proceselor de ecranare a vacanței profunde γ_0 .

$$\begin{aligned}
& |c_b^{(1)}(\infty)|^2(\gamma, \gamma_0, \delta, x) \\
&= \hbar^2 |M_{ba}|^2 \left\{ \frac{1}{(x - \varepsilon_B)^2 + \gamma^2} \right. \\
&+ e^{-\frac{\gamma}{\gamma_0}} \left\{ \frac{e^{-\frac{\gamma}{\gamma_0}} - 2 \cos \frac{x - \varepsilon_B}{\gamma_0}}{(x - \varepsilon_B)^2 + \gamma^2} + \frac{e^{-\frac{\gamma}{\gamma_0}}}{(x - \varepsilon_B - \delta)^2 + \gamma^2} \right. \\
&\left. \left. - 2 \frac{((x - \varepsilon_B)(x - \varepsilon_B - \delta) + \gamma^2) \left(e^{-\frac{\gamma}{\gamma_0}} \cos \frac{\delta}{\gamma_0} - \cos \frac{x - \varepsilon_B - \delta}{\gamma_0} \right) - \delta \gamma \left(e^{-\frac{\gamma}{\gamma_0}} \sin \frac{\delta}{\gamma_0} - \sin \frac{x - \varepsilon_B - \delta}{\gamma_0} \right)}{((x - \varepsilon_B)(x - \varepsilon_B - \delta) + \gamma^2)^2 + \delta^2 \gamma^2} \right\} \right\}
\end{aligned} \tag{5}$$

Formula (9) poate părea complicată, însă conține funcții obișnuite și nu implică nicio operație numerică suplimentară (de exemplu, convoluție). Aceste profile au următoarele avantaje față de profilul Doniach–Šunjić sau versiuni ale acestuia combinate cu linii Gauss (etc.), discutate anetrior:

- a) Sunt integrabile, deci se poate evalua în orice moment intensitatea liniei;
- b) Sunt pozitiv definite aproape peste tot, în afara cazului în care $\tau_0 \Delta \omega \ll 2\pi$, ceea ce ar implica a se cunoaște diferența dintre cele două energii ale stării finale cu o precizie mult mai bună decât ne permit relațiile lui Heisenberg;
- c) Există o semnificație imediată a tuturor parametrilor de fitare. Astfel:
 γ – parametru energetic legat prin relația lui Heisenberg de timpul de viață al stării excitate în raport cu dezexcitățile Auger (și fluorescente) ale vacanței profunde;
 γ_0 – parametru energetic legat (Heisenberg) de timpul de viață în raport cu ecranarea vacanței profunde de către electronii de conducție;
 ε_B – energia de legătură;
 δ – diferența de energii de legătură datorată ecranării vacanței profunde de către electronii de conducție;
 x – variabila independentă (energia de legătură variabilă din spectrul de fotoemisie).

Câteva exemple de profile obținute din formula dinainte sunt date în Figura 1. Se observă că se pot obține profile extrem de variate, cu cel puțin două maxime în destul de multe cazuri, pornindu-se de la modelul foarte simplu propus în acest studiu.

Concluzii și perspective:

S-a propus un nou profil asimetric pentru analiza spectrelor XPS ale metalelor, care să înlocuiască profilul Doniach–Šunjić sau alte profile propuse fără fundamentare fizică în literatură. Noul profil are avantajele următoare: (a) este dedus în cadrul unei teorii cuantice absolut de înțeles pentru toată lumea; (b) în consecință, parametrii introduși suplimentar și care dictează abaterea liniei de la profilul Lorentz obișnuit au semnificație fizică imediată; (c) profilul este integrabil, deci poate fi folosit pentru a se face evaluări cantitative; (d) profilul nu prezintă comportări absurde de tip secțiune eficace negativă; (e) și, nu în ultimul rând, primele analize ale datelor experimentale folosindu-se acest profil sunt mult mai bune și oferă parametri rezonabili, față de analizele folosindu-se profilele propuse până în prezent în literatură.

În continuare, se lucrează la “rafinarea” profilului experimental folosindu-se noi ingrediente:

a) În primul rând, s-a dezvoltat și o formulă pentru integrala acestui profil asimetric. Din păcate, formula este extrem de complicată și, în plus, conține funcții mai puțin cunoscute și implementate în coduri, cum ar fi sinus integral (Si) și cosinus integral (Ci). Privind ecuația (3.7), deducem că primul și al treilea termen au primitivele date de:

$$\tan^{-1} \frac{x - \varepsilon_B}{\gamma}, \text{ respectiv } e^{-\frac{\gamma}{\gamma_0}} \tan^{-1} \frac{x - \varepsilon_B - \delta}{\gamma}$$

Însă primitiva celui de-al doilea termen este:

$$\int \frac{\cos(x)}{x^2 + a^2} dx = \frac{-i \cosh(a) \text{Ci}(x - ia) + i \cosh(a) \text{Ci}(ia + x) + \sinh(a) (\text{Si}(ia - x) - \text{Si}(ia + x))}{2a} + \text{constant}$$

(rezultate furnizate de Wolfram Mathematica). În aceste condiții, nu se poate implementa în mod convenabil această formulă în codurile de analiză a datelor experimentale. Așadar, pentru fondul inelastic vom rămâne deocamdată la funcții de tip arctangentă sau primitive ale profilului Voigt.

b) În al doilea rând, pe modelul teoriei dezvoltate în aceasta etapa, se pot dezvolta mai multe modele introducându-se ecranarea progresivă a vacanței profunde de către electronii de conducție, fie liniară, fie exponențială, fie care ecranare și “dez-ecranare” periodică, vezi Figura 8.

În consecință, trebuie făcute eforturi în continuare de a se analiza printr-o teorie “tractabilă” procesele fundamentale care intervin la interacțiunea radiației cu materia și pentru a se propune modele de simulare cât mai potrivite, adaptabile și cu semnificație fizică. Aici este un domeniu la interfața dintre teorie și experiment în care trebuie făcute progrese serioase în viitorul apropiat.

Titlu Fază: Investigarea efectului dopării cu siliciu asupra interacțiunilor spin-spin în nanoparticule de α – Fe₂O₃

Termen: 27.04.2021

Obiective: Vor fi efectuate studii complexe prin tehnici de rezonanță electronică de spin (RES) și microscopie electronică de înaltă rezoluție (HRTEM) asupra unor pulberi nanostructurate de α -Fe₂O₃ utilizate pentru disocierea fotoelectrochimică a apei.

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

Cercetările efectuate în cadrul acestei faze au urmărit determinarea mecanismului prin care prezenta siliciului afectează atât morfologia și structura nanoparticulelor de α -Fe₂O₃ cât și proprietățile lor magnetice. Au fost investigate probe de pulberi nanostructurate de α -Fe₂O₃ dopate cu siliciu în concentrații atomice Si/(Fe + Si) = 0%, 0.22%, 0.4%, 0.6%, 0.8%, 1%, 2%, 3%, 4%, 5%, 10%, 15%, 20% și 50% furnizate de către parteneri.

Imaginile selectate de microscopie electronică prin transmisie convențională (CTEM) ilustrează modul în care se modifică morfologia NP datorită creșterii dopajului. Pentru proba Si 0%, NP sunt predominant sferice cu un diametru ce variază între 17 și 150 nm (Fig. 1a, 1d). În proba Si 4%, în afara de nanoparticulele sferice cu un diametru între 8 și 47 nm, apar și nanofire (Fig. 1b, 1e) cu o lungime de 70 - 340 nm și diametru în domeniul 6 - 73 nm. În cazul probei Si 50% cu dopajul cel mai mare, diametrul NP sferice a scăzut la 5 - 40 nm (Fig. 1c, 1f), iar nanofirele au lungimea cuprinsă între 70 și 650 nm, în timp ce diametrul lor variază între 16 și 100 nm. Diagramele de difracție de electroni (insertii în Fig. 1a, 1b, 1c) demonstrează faptul că creșterea nivelului de dopare nu modifică structura cristalină a hematitului. Imaginile TEM de înaltă rezoluție (HRTEM) (Fig. 1g, 1h, 1i) ilustrează faptul că NP sunt

bine cristalizate. Unele dintre nanoparticulele de hematit au suferit transformari in timpul investigatiei sub incidenta fascicului de electroni, aparand cu un gol in centru.

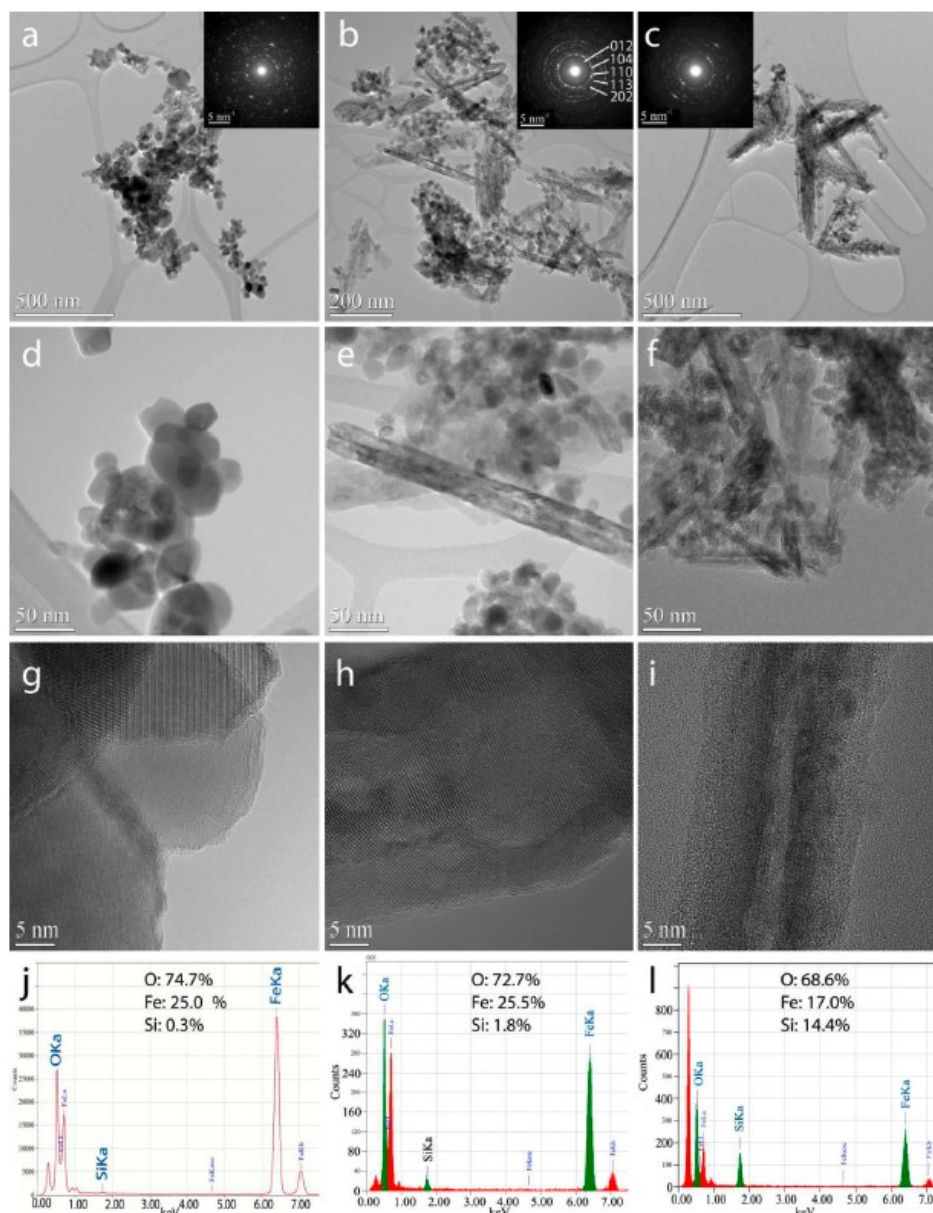


Figura 1. Imagini CTM (a-f), HRTEM (g-i) si spectre EDX (j-l) pentru probele Si 0% (prima coloana), Si 4% (a doua coloana) si Si 50% (a treia coloana).

Concluzii și perspective:

Rezultatele obtinute demonstreaza influenta proprietatilor structurale, magnetice si electronice asupra cresterii preferentiale a nanocrystalilor de α -Fe₂O₃ dopat cu Si, in care transportul de sarcina este controlat de polaroni electronici mici, deschizand astfel o noua cale in proiectarea la scara nano a unor dispozitive FEC eficiente.

Titlu Fază: Biocompatibilitatea sistemelor pe baza de matrici de nanofire miez – coaja decorate cu argint

Termen: 10.05.2021

Obiective: Obiectivul principal este de a prepara matrici de nanofire de tip miez-coaja ZnO-CuO decorate cu argint si a testa biocompatibilitatea acestora in prezenta diferitelor linii celulare, pentru aplicatii de tip (bio) senzori electrochimici.

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

In acest context, studiul de fata isi propune urmatoarele activitati: i) prepararea de matrici de nanofire cu arhitectura miez-coaja ZnO-CuO decorate cu argint utilizand oxidarea termica in aer (miezul de tip nanofire de ZnO), pulverizarea catodica cu magnetron in radio-frecventa (coaja de tip film subtire de CuO) si respectiv evaporarea termica in vid pentru acoperirea nanofirelor de tip miez-coaja cu nanoparticule de Ag); ii) caracterizarea morfologica, compositionala, structurala si electrochimica a matricilor de nanofire; iii) testarea matricilor de nanofire cu arhitectura miez-coaja ZnO-CuO decorate cu argint in linii de cultura celulare in vederea investigarii viabilitatii celulare si a citotoxicitatii acestora.

Proprietatile morfologice, compositionale si structurale ale matricilor de nanofire au fost evaluate utilizand microscopia electronica de baleiaj cu emisie in camp (FESEM) - Zeiss Merlin Compact, spectroscopia de raze X cu dispersie dupa energie (EDX) - Zeiss Evo 50 XVP echipat cu accesoriul EDX de la Bruker, spectroscopia de fotoelectroni (XPS) si difractia de raze X (XRD) - Bruker AXS D8 Advance. Proprietatile electrochimice ale probelor au fost investigate prin spectroscopie de impedanta electrochimica folosind un potentiostat/galvanostat Merohm Autolab MultiAutolab. Viabilitatea si toxicitatea celulara a probelor a fost studiata efectuand testul MTT si microscopie de fluorescenta utilizand linia celulara L929 derivata din fibroblaste de soarece.

Matricile de nanofire de tip miez-coaja ZnO-CuO decorate cu argint au fost obtinute combinand oxidarea termica in aer cu pulverizarea catodica cu magnetron in radio-frecventa. Astfel, matricile de nanofire de ZnO (miezul) au fost preparate prin oxidarea termica in aer a unor folii de Zn. Ulterior, acestea au fost acoperite cu un film de CuO (coaja) prin pulverizare catodica cu magnetron in radio-frecventa. In final, matricile de nanofire de tip miez-coaja ZnO-CuO au fost decorate cu nanoparticule de Ag utilizand evaporarea termica in vid. Probele obtinute au fost denumite dupa cum urmeaza: P0 – folie de Zn; P1 – matrice de nanofire de ZnO si P2 – matrice de nanofire de tip miez-coaja ZnO-CuO decorate cu nanoparticule de Ag.

Figura 1 prezinta spectrele EDX si imaginile FESEM ale matricilor de nanofire. Spectrele EDX ale probelor P1 (Figura 1A) si P2 (Figura 1B) confirma prezenta elementelor de Zn, Cu, O si Ag din componenta matricilor de nanofire. Imaginile FESEM la mariri diferite pun in evidenta, atat pentru P1 cat si pentru P2, faptul ca nanofirele au forma cilindrica si un raport mare suprafata la volum, avand o lungime de pana la 30 μm si diametre de ~ 30 nm in cazul probei P1 (Figura 1C si 1E) si de ~ 70 nm in cazul probei P2 (Figura 1D si 1F).

In vederea verificarii viabilitatii celulare si a citotoxicitatii induse de materialele nanostructurate a fost folosita linia celulara L929 derivata din fibroblaste de soarece. Celulele fibroblaste au fost crescute in placa de cultura cu 24 de godeuri (densitate initiala 28 000 celule/ godeu), folosind mediu de cultura MEM (*Minimum Essential Medium*) suplimentat cu 10% ser fetal bovin si 1% antibiotice (streptomicina si penicilina), in conditii controlate (umiditate, 5% CO_2 , 37°C). Dupa cultivarea celulelor timp de 24 h, gradul de proliferare celulara a fost investigat folosind testul MTT, care are la baza transformarea sarii de tetrazoliu MTT (bromură de 3(4,5-dimetiltiazol-2-il)-2,5-difeniltetrazoliu), sub actiunea succinat-dehidrogenazei mitocondriale din celulele viabile, în formazan, compus insolubil în apă. Pentru determinarea proliferarii celulare, după 2 ore de incubare a celulelor crescute pe probe, produsul de reducere a MTT a fost solubilizat în solutie de DMSO (dimetilsulfoxid) si determinata densitatea optică prin măsurarea absorbantei la 590 nm utilizând un cititor de microplaci. Rezultatele obtinute au fost comparate cu cele obtinute pentru o suprafata de control, placa de cultura si o alta suprafata plana, sticla. Investigatiile au pus in evidenta faptul ca suprafetele probelor P1 si P2 induc o crestere semnificativa a absorbantei formazanului in comparatie cu proba control (Figura 2 Stanga). Deoarece valorile absorbantelor inregistrate pentru probele P1 si P2 sunt foarte mari in raport cu cea obtinuta in cazul probei control indicand o proliferare celulara superioara probei control, pentru o mai buna interpretare a acestor rezultate au fost inregistrate imagini de microscopie de fluorescenta dupa marcarea in prealabil a celulelor cu indicatorul fluorescent faloidina-FITC, specific pentru filamentele de actina – verde (Figura 2 Dreapta).

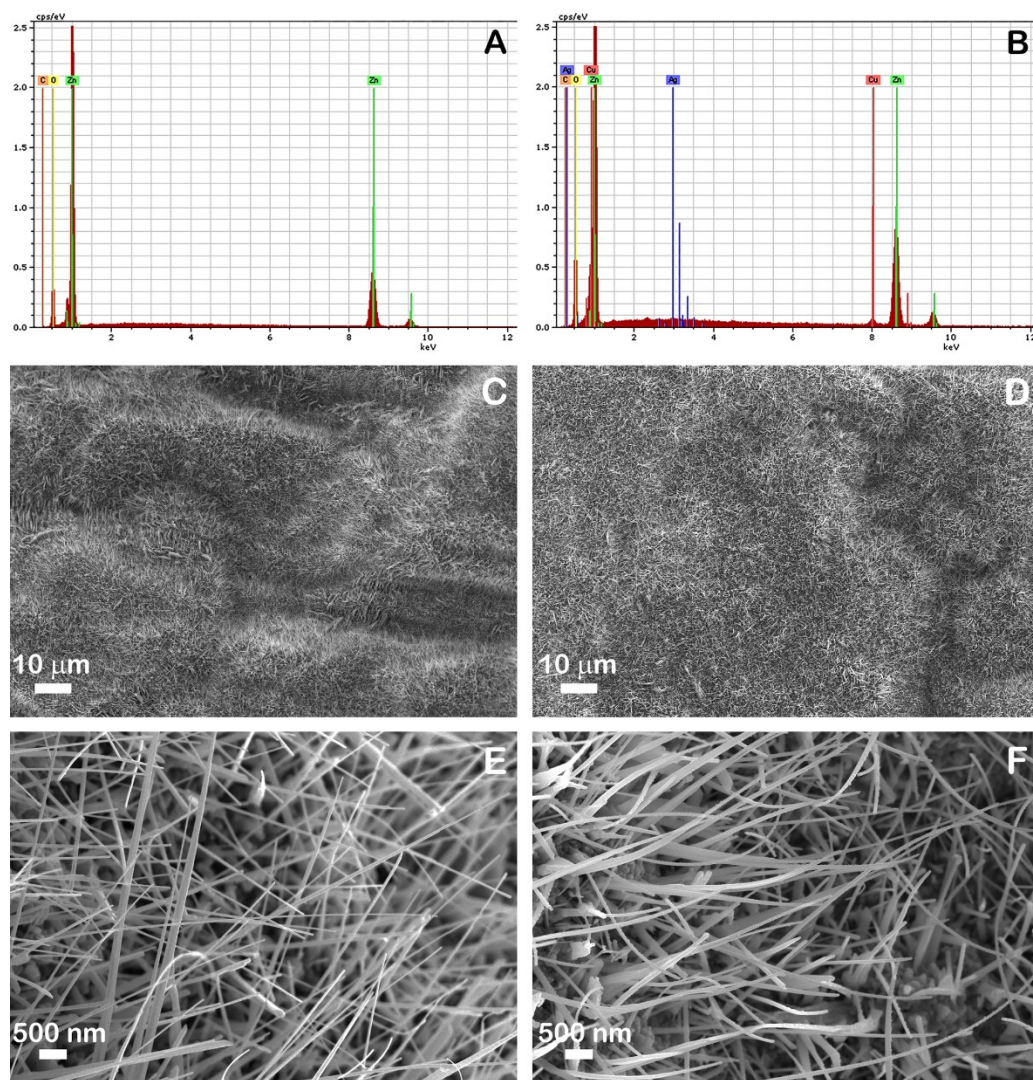


Figura 1. A), B) Spectrele EDX si C), D), E) si F) Imaginile FESEM la mariri diferite ale probelor: A), C) si E) P1 si B), D) si F) P2.

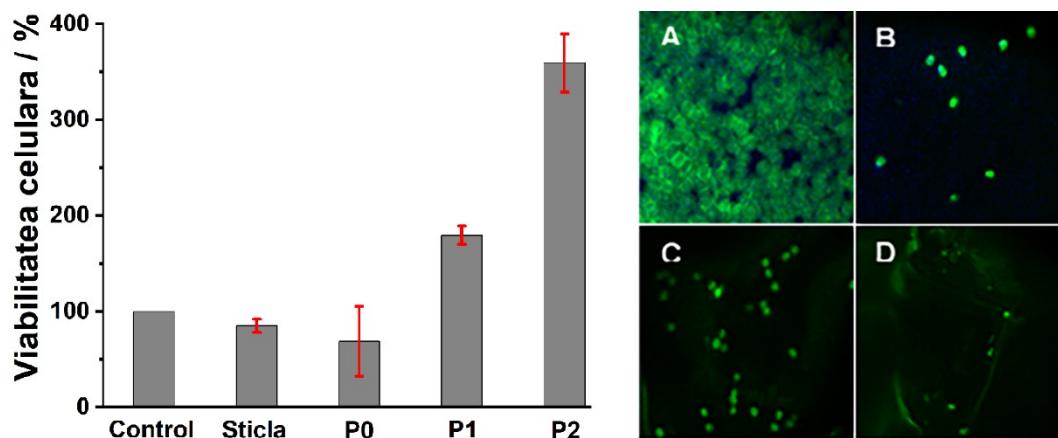
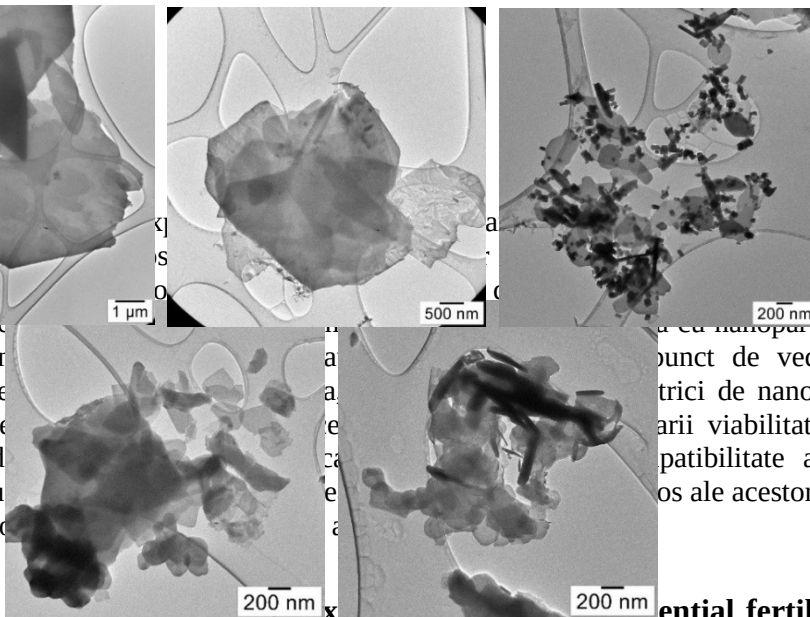


Figura 2. Stanga: Viabilitatea celulara pentru diferite suprafete in raport cu proba control; Dreapta: Imagini de microscopie de fluorescenta, la magnificarea x20, obtinute pentru celule L929 crescute pe: A) sticla, B) P0, C) P1 si D) P2.

Concluzii

Raportul de sinteză prezintă rezultatele studiului privind efectul nanofire miez-coaja ZnO de ZnO, pulverizate și respectiv evaporarea termică continuă, matricile de nanofire compozițional, structural și morfologic, decorate cu argint au fost testate pentru citotoxicitatea acestora. Studiile investigate sunt puternic influențate de condițiile de sinteză.

Obiectivul de cercetare propus este:



cu arhitectura de tip nanofire subțire de CuO și nanoparticule de Ag. În punct de vedere morfologic, matricile de nanofire miez-coaja au o viabilitate celulară și o biocompatibilitate ale materialelor utilizate ale acestora.

Titlu Fază: Sinteza

frunzele plantelor

Termen: 10.05.2021

Obiective: Sinteza și caracterizarea hidroxiazotatului de zinc, potențial fertilizator pentru frunzele plantelor

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

Două materiale cu aceeași formula chimică $Zn_5(OH)_8(NO_3)_2 \cdot 2H_2O$ au fost obținute prin două metode de sinteză care au implicat folosirea aceluiași precursori și următoarele etape:

- Metoda co-precipitării: o soluție mixtă de azotat de zinc și azotat de mangan, cu amestec corespunzător unei concentrații nominale de 1000 ppm Mn^{2+} , a fost ușor acidificată cu 250 mL HNO_3 (1M). Sub agitare continuă s-a adăugat cu debit controlat o soluție de NaOH la 35 °C. După o oră de maturare, precipitatul format a fost spălat și colectat prin centrifugare, după care uscat la 60 °C. Materialul obținut a fost denumit ZHN_{COPP} pentru simplificare.

- Metoda reacției în fază solidă: cantități corespunzătoare (pentru o concentrație nominală de 1000 ppm Mn^{2+}) de azotat de zinc și azotat de mangan au fost amestecate într-un mojar de agat cu cantitatea stoichiometrică de NaOH, fără adaos de apă sau alt solvent. Pasta omogenă care s-a format a fost colectată într-un pahar și precipitatul a fost spălat și separat prin centrifugare, și ulterior uscat la 60 °C. Materialul obținut a fost denumit ZHN_{SSR} .

Doparea cu ioni Mn^{2+} a fost efectuată cu o concentrație mică (0.1%), pentru a nu afecta rețeaua cristalină gazdă (Mn ca sonda paramagnetică), și nici morfologia lamelară. Deși adaosul de Mn^{2+} alături de Zn^{2+} este benefic plantelor, este posibil să inducă schimbarea morfologiei, scăzând aderența micro-cristalelor la frunze.

Investigațiile structurale prin difracție de raze X (XRD) au fost efectuate cu un difractometru Bruker D8 Advance cu anod de Cu și filtru Ni ($\lambda = 0.154184$ nm). Parametrii de rețea ai structurilor cristaline identificate și diametrul mediu de cristalit au fost determinați prin metoda Rietveld folosind programul Topas v.3 - Bruker. Investigații structurale și morfologice au fost efectuate cu un microscop electronic JEOL 2100. Spectrele FTIR (spectroscopie optică în infraroșu cu transformata Fourier) au fost înregistrate cu un spectrometru Spectrum BX II (Perkin Elmer), în domeniul spectral 4000 - 400 cm^{-1} . Probele au fost pastilate în KBr în raport masic probă:KBr 1:100. Pulberile sintetizate au fost introduse în tuburi de cuarț cu diametrul interior de 2 mm. Tratamentele termice în pulsuri au fost efectuate în aer, în pași de 10 °C, timp de 10 minute fiecare, într-un cuptor stabilizat în temperatură (± 1 °C). După fiecare pas al tratamentului termic, proba a fost racită la temperatura camerei și investigată prin RES (spectroscopie de rezonanță electronică de spin). Măsurătorile RES au fost efectuate în benzile de microunde X (9.5 GHz) și Q (34 GHz), folosind spectrometrele Bruker ELEXSYS-E580X și respectiv -E500Q. Parametrii RES ai centrilor paramagnetici au fost determinați prin simulare și fitare cu programul EasySpin v.5.2.28.

TEM. În figura 1 prezentăm imagini TEM la mărirea mică ale probelor ZHN_{COPP} (Fig. 1 - sus) și ZHN_{SSR} (Fig. 2 - jos), care arată o morfologie de tip lamelar, cu placute mari, de sute de nm.

Fig. 1. Imagini TEM la marire mica ale probelor ZHN_{COPP} (sus) si ZHN_{SSR} (jos).

Proba ZHN_{COPP} (Fig. 1 - sus) contine placute cu o distributie mai larga de dimensiuni, cu multe placute de cativa microni, pana spre 10 microni. Particulele mici, de zeci de nm si cu contrast puternic corespund fazei minoritare ZnO. Nu prezentam aici imagini la marire mare, HRTEM si nici difractii de electroni, deoarece proba se descompune in fascicul chiar si in cele mai *blande* conditii de iradiere (tensiune mica de accelerare – 80 kV si iluminare slaba).

Concluzii și perspective:

Obiectivele fazei au fost indeplinite in totalitate: am sintetizat ZHN prin doua metode: co-precipitare si reactie in faza solida, apoi am caracterizat comparativ proprietatile morfo-structurale si stabilitatea termo-chimica la tratamente termice in aer, utilizand multiple tehnici de analiza: XRD, TEM, FTIR, RES, DSC. Tranzitiile de faza au fost puse in evidenta cu precizie mare prin experimente RES pe probe tratate termic in pulsuri, folosind ioni Mn^{2+} ca sonda paramagnetica. Aceste experimente complexe sunt de interes deoarece, in functie de metoda de sinteza si conditiile de tratament termic, descompunerea catre ZnO se poate face in mai multe etape cu compusi intermediari diferiti, fiind un proces complex. Acest lucru a fost demonstrat de experimentele noastre: descompunerea $Zn_5(OH)_8(NO_3)_2 \cdot 2H_2O$ catre ZnO a avut loc cu formarea concomitenta a fazei $Zn_3(OH)_4(NO_3)_2$ peste 100°C, care se descompune catre ZnO in jur de 200°C, pentru ambele metode de sinteza. In concluzie ambele metode sunt recomandate pentru obtinerea unui bun fertilizator al frunzelor plantelor, obtinandu-se structuri lamelare cu arii mari (diametre de la sute de nanometri la micrometri) si stabilitate termica buna.

Aceste rezultate fac obiectul unui manuscris cu titlul : *In-depth morpho-structural study of the $Zn_5(OH)_8(NO_3)_2 \cdot 2H_2O$ decomposition towards ZnO*, autori: I. D. Vlaicu, D. Ghica, M. Stefan, C. Radu, D. Culita, D. Radu, pentru trimitere la o revista cotate ISI in Q1, cum ar fi *Sci. Rep., Phys. Chem. Chem. Phys.*

Titlu Fază: Obținerea și caracterizarea fizico-chimică a nanoparticulelor de oxid de fier funcționalizate pentru tratamentul neoplasmelor.

Termen: 10.05.2021

Obiective: Obținerea și caracterizarea fizico-chimică și biologică a nanoparticulele de oxid de fier funcționalizate cu aplicații în tratamentul neoplasmelor.

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

Scopul acestei cercetari a fost acela de a prepara nanoparticule oxid de fier acoperite cu siliciu printr-o metoda adaptata in laboratorul nostru pornind de la un amestec de clorura de fier tetrahidrata si clorura de fier hexahidrata

care ulterior a fost picurat într-un xerogel de siliciu. Structura și morfologia nanoparticulelor de oxid de fier în xerogel de siliciu (OFSi-NP) au fost analizate prin studii de difracție de raze X (DRX), microscopie electronică de baleiaj (MEB) și microscopie electronică în transmisie (MET).

Intr-un xerogel de siliciu sub agitare puternică timp de aproximativ 1 oră a fost picurat amestecul de clorura de fier tetrahidrata ($\text{FeCl}_2 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$) și clorura ferică hexahidrata ($\text{FeCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$) în HCl 2M (raportul $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+} = \frac{1}{2}$). Solutia inițială a xerogelului de siliciu a fost preparată amestecând tetraetilortosilicat cu apă și etanol [33]. Rapoartele dintre apă și TEOS și etanol la TEOS au fost de 10:1 și 5:1. Gelul pe baza de oxid de fier și siliciu a fost format la temperatura camerei sub agitare puternică. Uscarea s-a realizat tot la temperatura camerei. Produsul final a fost macinat și mojarat pentru a obține o pulbere fină. Pulberea nanocompozită obținută (nanoparticule de siliciu-oxid de fier, OFSi-NP) a fost apoi tratată termic la 300°C într-un cuptor, timp de 12 ore.

În figura 1 sunt prezentate comparativ, datele experimentale și cele obținute după rafinarea Rietveld. Linia albastră reprezintă datele experimentale iar linia gri reprezintă datele calculate. Liniile verticale reprezintă poziția liniilor de difracție ale maghemitei și a siliciului amorf. Linia de sub linia gri reprezintă diferența de profil.

Maximul de difracție de la $2\theta = 23$ este specific siliciului amorf. Alte maxime de difracție (identificate în figura 1) corespundătoare indicilor Miller (hkl) de la (220), (311), (400), (422), (511) și (440) sunt specifice structuri cubice a maghemitei (grup spațial Fd3m, ICSD-PDF No. 79196) cu un parametru de rețea de 8.35 Å. În difractograma se poate observa o ușoară largire a liniilor de difracție, aceasta putând fi atribuită prezentei cristalitelor de dimensiuni mici [35]. Dimensiunea medie a nanoparticulelor estimată în urma studiilor DRX a fost de aproximativ 14 ± 0.1 nm. Rezultatele obținute în urma rafinării datelor DRX confirmă formarea structurii cubice spinel monofază aparținând grupului spațial Fd3m. Progresul rafinării Rietveld este monitorizat printr-o serie de parametri precum indicele R_{wp} al profilului ponderat și indicele “goodness of fit” (χ) reprezentând raportul dintre R_{wp} și R_{exp} .

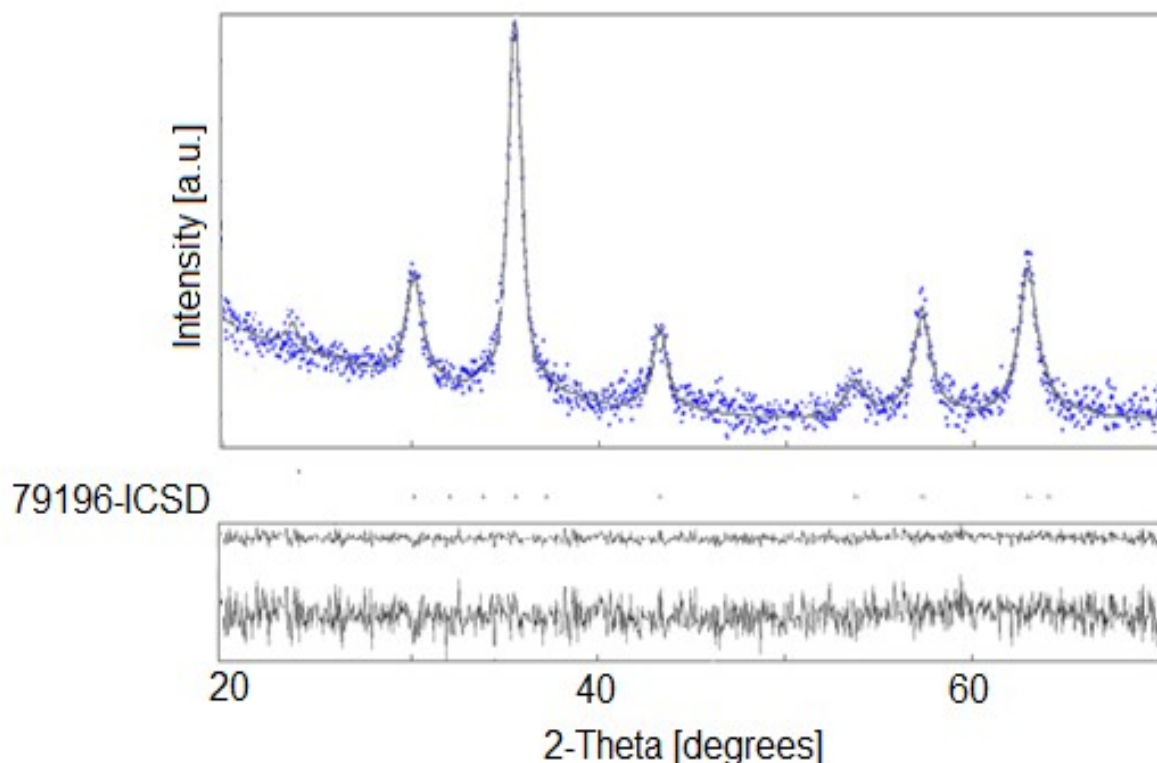


Figura 1: Difractograma obținută pentru OFSi-NP.

Concluzii și perspective:

Studiul de față s-a axat pe dezvoltarea unei metode de sinteză care să permită controlul diferiților parametri ai nanoparticulelor de oxid de fier funcționalizate. Nanoparticulele de oxid de fier au fost înglobate într-o matrice de

siliciu. Nanoparticulele magnetice acoperite cu siliciu au fost sintetizate prin adaugarea intr-un xerogel pe baza de siliciu a amestecului de clorura de fier tetrahidrata si clorura de fier hexahidrata. S-a facut un studiu sistematic al formarii oxidului de fier acoperit cu siliciu. OFSi-NP au fost caracterizate prin diverse tehnici si s-a dovedit ca au o distributie de dimensiuni ingusta cu o dimensiune medie dedusa din studiile MET de aproximativ 17.5 ± 2 nm, rezultat care este in acord cu dimensiunea dedusa din analiza DRX care a fost estimata la 14 ± 0.1 nm.

Pentru o mai buna intelegere a comportamentului acestor nanoparticule asupra sanatatii se vor efectua in viitor studii complexe asupra toxicitatii induse dupa instilarea intratraheala a nanoparticulelor OFSi-NP.

Articol publicat: Predoi, D.; Iconaru, S.L.; Ciobanu, S.C.; Predoi, S.-A.; Buton, N.; Megier, C.; Beuran, M. Development of Iron-Doped Hydroxyapatite Coatings. Coatings 2021, 11, 186. <https://doi.org/10.3390/coatings11020186>

Titlu Fază: Investigarea comparativa a proprietatilor nanostructurilor oxidice de tip 3f-4d procesate diferit: metalurgia pulberilor, respectiv Spark Plasma Sintering (SPS).

Termen: 10.06.2021

Obiective: Obținerea structurilor perovskitice de tipul REFeO_3 (unde $\text{RE} = \text{Tb}^{3+}, \text{Gd}^{3+}, \text{Dy}^{3+}$ si Ho^{3+}) prin 2 metode diferite: metoda clasica (metalurgia pulberilor) si Spark Plasma Sintering (SPS), o metoda neconventionala si rapida de procesare si apoi investigarea acestora.

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

Compusii pe baza de pamanturi rare cu structura perovskitica simpla de tipul REFeO_3 , unde $\text{RE} = \text{Gd}, \text{Tb}, \text{Dy}$ si Ho au fost obtinuti in premiera prin doua metode neconventionale, rapide si facile de procesare. In metoda hidrotermala modificata prin adaugarea unui surfactant non-ionic de tip Pluronic 123 ($\text{MW} = 5800$ g/mol), cantitati corespunzatoare de saruri de pamanturi rare ($\text{Gd}^{3+}, \text{Tb}^{3+}, \text{Dy}^{3+}$ si Ho^{3+}) si de Fe^{3+} au fost dizolvate in etanol anhidru obtinandu-se solutii de precursori. Acestea au fost adaugate peste solutia de surfactant iar amestecurile obtinute au fost incalzite la 70°C . Aerogelul format, a fost supus unei analize termice de tip TG-DSC pentru a se putea stabili cu exactitate temperatura de obtinere a structurii perovskitice. In fig. 1 sunt reprezentate cele 2 curbe TG-DSC masurate pe precursorul de TbFeO_3 in flux de aer sintetic ($80\% \text{N}_2 / 20\% \text{O}_2$) cu o viteza de incalzire de $5^\circ\text{C}/\text{min}$.

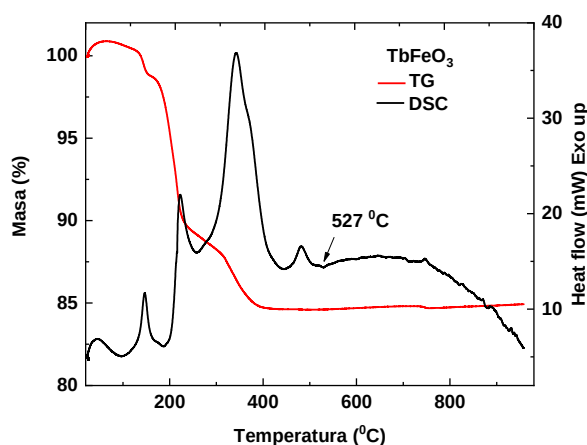


Figura 1. Curbele TG-DSC obtinute pe aerogelul de TbFeO_3 prin incalzirea lui in flux de aer sintetic (debit de 16 ml/min.) cu o viteza de $5^\circ\text{C}/\text{min}$.

Cel de-al doilea set de ortoferite a fost obtinut prin metoda SPS. Astfel, intr-o prima etapa au fost obtinuti perovskitii sub forma de pulberi prin metoda clasica: amestecuri stoechiometrice de oxizi de pamanturi rare si fier au fost mojarati timp de 30 min. dupa care au fost calcinati la temperatura de 950°C , timp de 2h. Pulberile perovskitice au fost procesate prin SPS intr-o matrita de grafit. Tratamentul termic de sinterizare a constat in

incalzirea rapida a probelor la temperatura de 850 °C cu o viteza de 250 °C/min aplicandu-se o presiune de 10 KN, mentinerea in palier timp de 3 minute dupa care probele au fost racite, obtinandu-se pastile cu diametrul de 10 mm. Pe parcursul tratamentului termic de sinterizare, probele s-au densificat avand contractii de aprox. 1.20 mm asa cum reiese din figura 2b, dar, se observa si un fenomen de relaxare a materialului la racire. In figura 2a este reprezentata distributia presiunii aplicate pe probe in timpul sinterizarii.

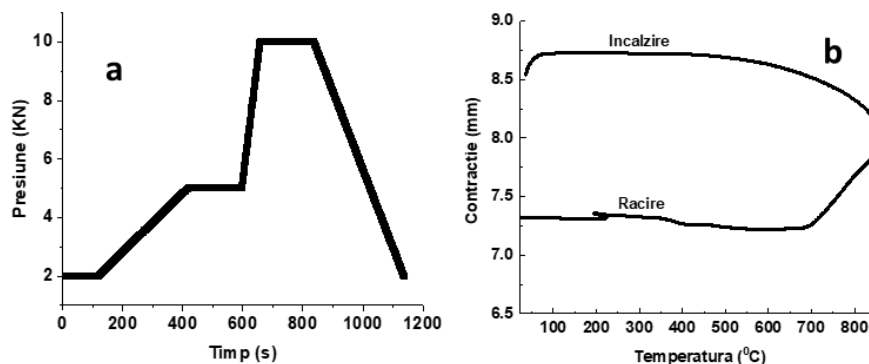


Figura 2. Distributia presiunii aplicate pe probele perovskitice de tipul $REFeO_3$ ($RE=Dy, Gd, Tb$ si Ho) in timpul tratamentului de sinterizare in SPS (a), densificarea pulberilor perovskitice in timpul sinterizarii SPS (b).

Dupa sinterizarea SPS se obtine un amestec de faze perovskitice, faza cu vacante de oxigen reprezentand cca. 45-50%. Calcinarea in aer a probelor sinterizate conduce la refacerea fazei perovskitice in proportie de aprox. 90%, procentul de faza defectata ramas fiind slab detectabil in difractie. Aceasta va fi evidentiata prin spectroscopia Mössbauer. Dimensiunile de cristalite sunt cuprinse in domeniul 40-50 nm, cresterea datorandu-se celor doua tratamente termice realizate succesiv.

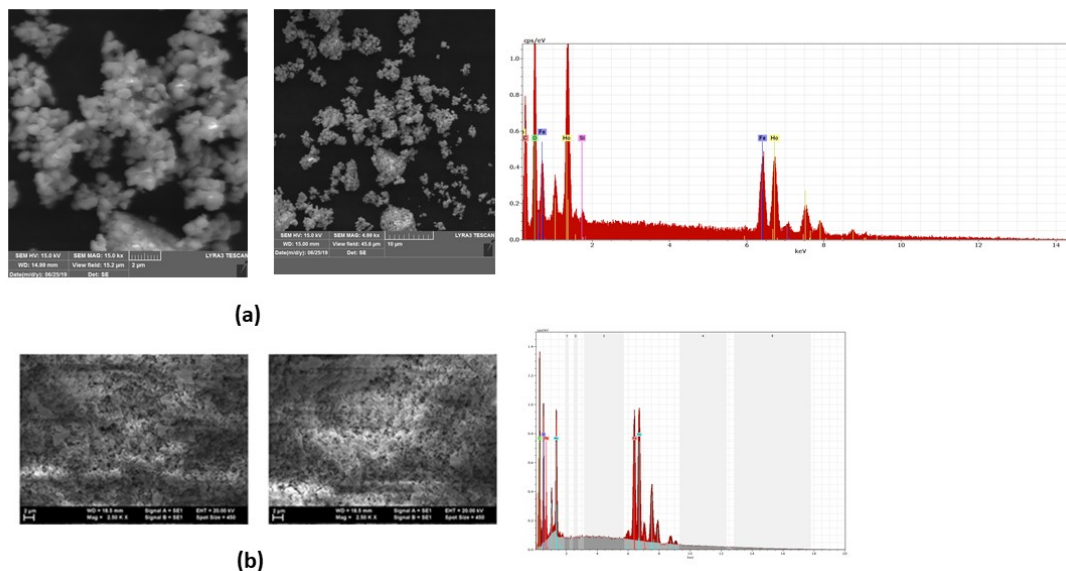


Figura 3. Imagini SEM si spectrele EDX achizitionate pe compusul de tip $HoFeO_3$ procesat prin metoda hidrotermala (a), respectiv, sinterizare SPS (b).

Microscopia electronica de baleiaj (SEM) confirma dimensiunile de particule obtinute din spectrele de difractie si evidentiaza o morfologie total diferita pentru cele doua metode de procesare. Pentru exemplificare, in fig.3 sunt reprezentate imaginile SEM impreuna cu spectrele EDS corespunzatoare achizitionate pe proba de

HoFeO₃ procesata prin cele 2 metode. Imaginile SEM obtinute pe proba sintetizata hidrotermal (fig. 3a) evidentiaza formarea de particule avand aspectul « fulgilor de nea », pufoase, in timp ce imaginile apartinand probei sinterizate prin SPS (fig. 3b) arata formarea unei structuri relativ compacte, constituita din agregate de aprox. 1-2 µm generate de clusterizarea cristalitelor. Acest fenomen este specific materialelor obtinute prin metoda SPS si se datoreaza presiunii mari aplicate in timpul procesarii. De asemenea, se observa pe suprafata probei aparitia unor zone de topitura posibil generate de “punctele fierbinti” induse de aplicarea in timpul procesarii a pulsurilor de curent de intensitate mare. Astfel, avem de-a face cu o stare de temperatura locala ridicata care determina vaporizarea si topirea suprafetelor particulelor de pulbere. In ambele cazuri, spectrele EDX confirma mentinerea stoechiometriei, rapoartele atomilor de pamant rar/ioni de fier fiind in concordanta cu fazele identificate prin difractie.

Concluzii și perspective:

In aceasta etapa de realizare a proiectului s-au folosit doua metode rapide si moderne de procesare a compusilor cu structura perovskitica pe baza de pamanturi rare care au permis obtinerea lor la temperaturi scazute de procesare stabilite in special prin analiza termica diferentiala. A fost evidentiat faptul ca procesarea prin metoda SPS modifica considerabil stoechiometria compusilor perovskitici prin generarea unui numar substantial de vacante de oxigen. Dupa sinterizarea in SPS raportul dintre faza perovskitica stoechiometrica si faza cu deficit de oxigen a fost de aprox. 1 :1. Acesta a fost imbunatatit prin tratarea in aer a compusilor obtinuti. Dupa calcinarea acestora, faza perovskitica stoechiometrica a fost refacuta in proportie de aprox. 90%, mai putin pentru compusul DyFeO₃ unde procentul de faza a ramas la 51% pentru faza perovskitica si 47% DyFeO_{3-x}, restul fiind reprezentat de oxid de fier. Acest comportament s-a regasit in evolutia proprietatilor magnetice unde s-a observat o scadere semnificativa a magnetizarilor de saturatie, comparativ cu compusii obtinuti hidrotermal. Prin investigarea proprietatilor magnetice s-au evidentiat aparitia unor cuplaje puternice anti-feromagnetice intre cele doua subretele de fier si pamanturi rare, campurile de 7 T fiind insuficiente pentru a le desface la temperaturi ridicate. In continuarea proiectului ne propunem sa realizam pe de-o parte optimizarea parametrilor de procesare prin realizarea de studii legate de timpii si temperaturile de tratament termic al precursorilor in scopul obtinerii de faze unice la temperaturi cat mai mici, precum si o investigare complexa a proprietatilor specifice, in special cele feroelectrice si decelarea mecanismelor electronice implicate.

Indicatori:

Rezultatele acestui studiu fac obiectul a doua lucrari :

1. Comparative Mössbauer studies of 3d-4f nanostructures processed by unconventional methods, Cristina Bartha, Mihai Grigoroscuta, Simona Greculeasa, Nicu Iacob, Petre Badica acceptata a fi prezentata la Conferinta Internationala ICAME 2021.

2. Unconventional synthesis and antiferromagnetic properties of orthorhombic perovskite-type REFeO₃ (RE=Dy, Fe, Gd and Tb) nanocrystalline powders, care va fi trimisa la Ceramic International.

Lucrari publicate 2021:

1. Kaolin clay pottery discovered in the Roman city of Romula (Olt Country, Romania), P. Badica, A. Alexandru-Dinu, M. Grigoroscuta, C. Locovei, A. Kuncser, C. Bartha, G. Aldica, M. Negru, D. Batalu, N. Cruceru, L. Savulescu, **Journal of Archaeological Science: Reports** 36 (2021) 102899.
2. On the pinning force in high density MgB₂ samples, V. Sandu, A.M. Ionescu, G. Aldica, M.A. Grigoscuta, M. Burdusel and P. Badica, **Scientific Reports** (2021) 11:5951 <https://doi.org/10.1038/s41598-021-85209-2>.
3. Peculiarities of the structural and optical properties of rare-earth-doped phosphate glasses for temperature sensing applications, M. Elisa, S.M. Iordache, A.M. Iordache, I.C. Vasiliu, C.E.A. Grigorescu, B.A. Sava, L. Boroica, A.V. Filip, M.C. Dinca, C. Bartha, N. Acha, C.E. Aguado, **Journal of non-Crystalline Solids**, Volume 556, 15 March (2021) 120569

Titlu Fază: Modularea proprietatilor senzitive ale sistemului (1-x) SnO₂ – x NiO prin variatia domeniului de concentratii (x = 0.0 – 10.0) si a conditiilor de sinteza hidrotermala (pH si presiune de vapori)

Termen: 10.06.2021

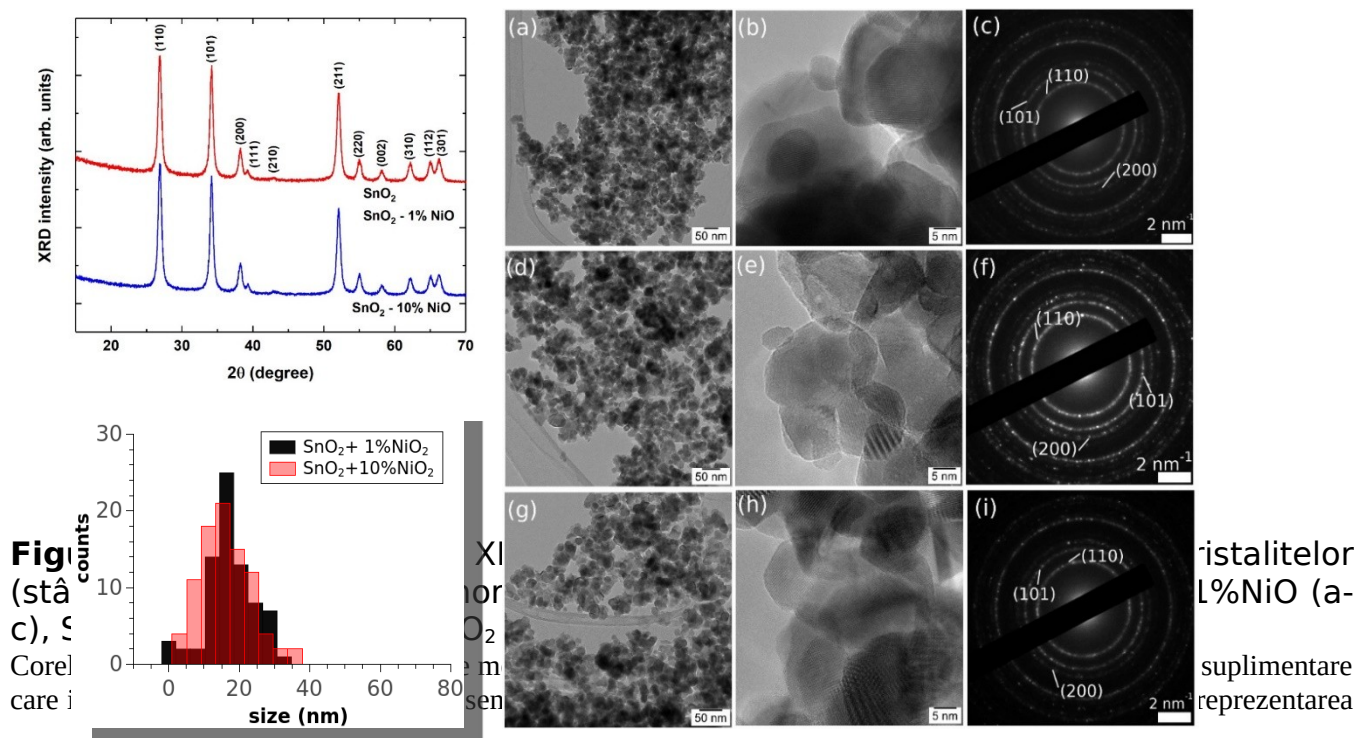
Obiective: elaborarea de solutii aplicative pentru imbunatatirea selectivitatii senzorilor chemorezistivi prin folosirea unui sistem binar de materiale oxidice semiconductoare, $(1-x) \text{SnO}_2 - x \text{NiO}$.

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

Au fost preparate pulberi de SnO_2 prin sinteză hidrotermală, folosind surfactantul neionic Brij 35 ca șablon. În prima etapă agentul tensioactiv a fost dizolvat în apă sub agitare puternică timp de 2 ore. S-a adăugat clorură de staniu (IV) pentahidrat ($\text{SnCl}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$) 98% menținând agitarea timp de 2h. PH-ul a fost ajustat la 2 folosind acid azotic (HNO_3), după încercări în domeniul 1-9. Soluția obținută a fost tratată hidrotermal la 180°C timp de 24 de ore sub presiune autogenă de 25 atm, după încercări la 4-25 atm. Precipitatul rezultat a fost spălat cu apă distilată, uscat și în cele din urmă calcinat la 550°C în aer. Cantitatea corespunzătoare de hidrat de $\text{Ni}(\text{NO}_3)_2$ a fost dizolvată în apă deionizată și adăugată prin picurare peste SnO_2 , urmată de ultrasonare timp de 5 minute, uscare la temperatura camerei timp de 24 ore și tratament termic la 400°C , în aer, pentru descompunerea nitraților și formarea NiO în concentrații de 1 și 10%. Pulberile obținute au fost amestecate cu 1,2 propandiol și pasta obținută a fost depusă pe substraturi comerciale de alumină prevăzute cu electrozi Pt și încălzitor posterior. Senzorii obținuți au fost etichetați: SnO_2 , SnO_2 -1%NiO și SnO_2 -10%NiO.

Investigații structurale și morfologice

Difracția de raze X (XRD) pentru pulberile obținute s-a realizat cu difractometrul de raze X Bruker D8 Advance ($\lambda = 0,1554184 \text{ nm}$) în configurația Bragg-Brentano. Toate cele trei eșantioane prezintă modele XRD similare, indexate ca SnO_2 tetragonal, grup spațial: $P4_2/mnm$ (136), ICDD - 04-014-0193. Modelul XRD pentru SnO_2 nedopat a fost identic cu modelul eșantionului SnO_2 dopat cu NiO 1%. Dimensiunea medie a cristalitelor este similară pentru probele de SnO_2 și SnO_2 -1%NiO: $d = 21,5 \pm 0,5 \text{ nm}$, respectiv $d = 20,5 \pm 0,5 \text{ nm}$ pentru SnO_2 -10%NiO. JEOL2100 echipat cu detectorul JEOL EDS (Energy Dispersive X-Ray) a fost utilizat pentru investigațiile CTEM (Microscopie electronică cu transmisie convențională), SAED (Diffraction Area Selected) și HRTEM (Microscopie electronică cu transmisie de înaltă rezoluție). Proprietățile morfologice, structurale și chimice ale sistemelor SnO_2 încărcate cu NiO. Imaginile din Figura 2 prezintă, pentru toate cele trei materiale, cristalite mono-cristaline în intervalul de 20 nm, unele dintre ele prezentând defecte extinse. Modelul SAED dezvăluie structura tetragonală SnO_2 , fără reflexii observabile din alte structuri cristaline (Figura 1).



primei derivate a semnalului pentru identificarea exactă a domeniului de liniaritate util pentru dezvoltarea aplicativă.

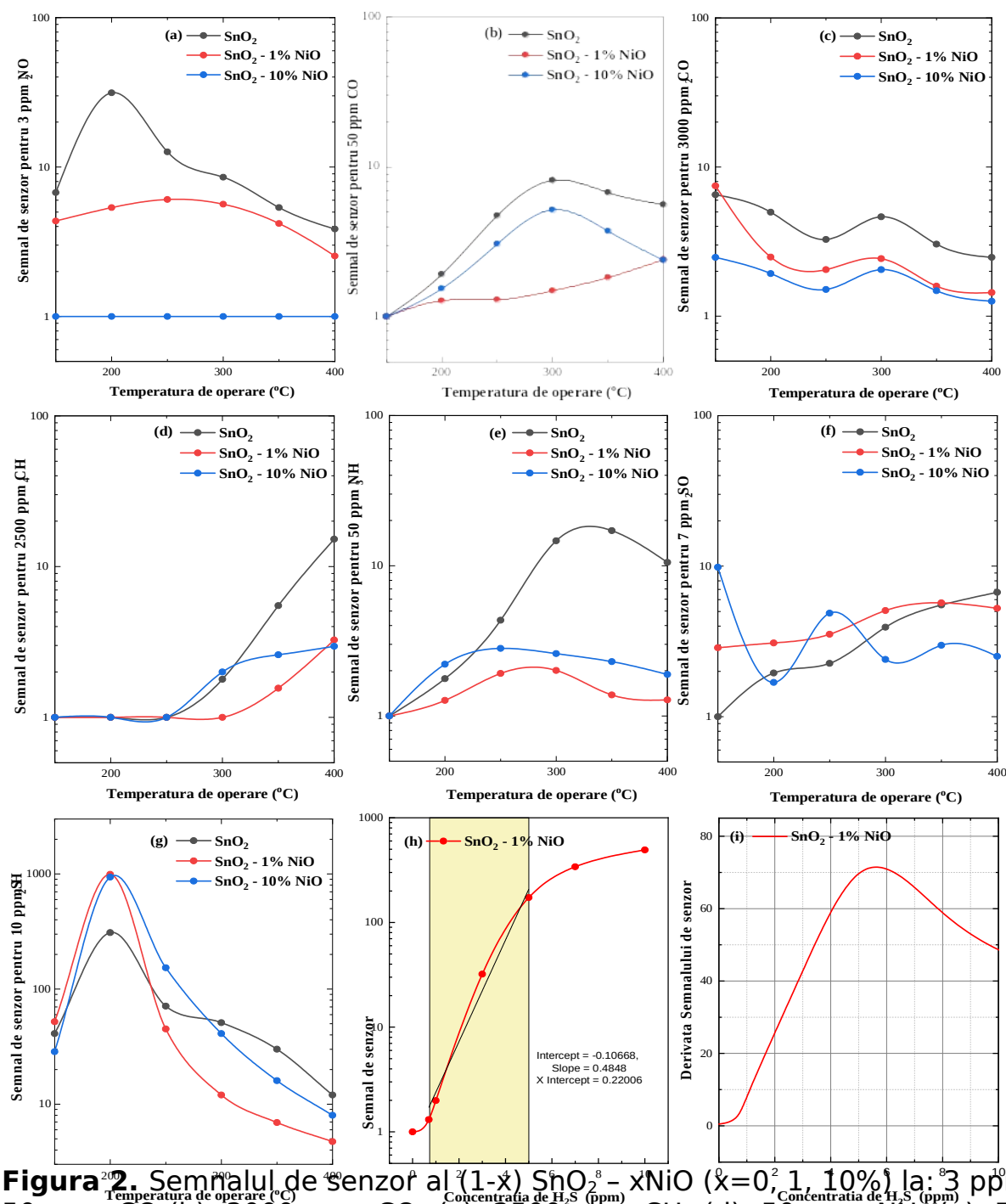


Figura 2. Semnalul de senzor al $(1-x)\text{SnO}_2 - x\text{NiO}$ ($x=0, 1, 10\%$) la: 3 ppm NO₂ (a); 50 ppm CO (b); 3000 ppm CO₂ (c); 2500 ppm CH₄ (d); 50 ppm NH₃ (e); 7 ppm SO₂ (f) și 10 ppm H₂S (g), pentru o plajă largă de temperaturi și 50%RH; Semnalul de senzor al SnO₂-1%NiO la temperatura de 200°C și 50% RH în funcție de concentrația de H₂S (h) și prima derivată a semnalului de senzor versus concentrația de H₂S (i).

Concluzii și perspective:

Materialele $(1-x)\text{SnO}_2-x\text{NiO}$ ($x = 0, 1, 10\%$) au fost preparate prin impregnarea umedă cu NiO a SnO_2 obținut prin sinteză hidrotermală asistată de Brij 35. A fost investigată influența temperaturii de funcționare asupra rezistențelor electrice ale materialelor obținute, raportat la %NiO și la %RH al atmosferei de teren simulate cu SMG. Sensibilitatea selectivă la H_2S a fost demonstrată prin utilizarea unui protocol general de dozare a gazelor potențial interferente: NO_2 , CO, CO_2 , CH_4 , NH_3 și SO_2 . $\text{SnO}_2 - 1\%\text{NiO}$ a fost selectat pentru investigații fenomenologice care au dus la identificarea mecanismelor de interacție. Dependența liniară a semnalului de senzor pentru concentrații de până la 5ppm H_2S în condiții de teren indică un potențial aplicativ promițător al acestui compus binar.

Rezultatele obținute fac obiectul lucrării științifice: "Sensing Properties of NiO Loaded SnO_2 Nanoparticles—Specific Selectivity to H_2S ", autori: Adelina Stanoiu, Andrei C. Kuncser, Daniela Ghica, Ovidiu G. Florea, Simona Somacescu and Cristian E. Simion, *Chemosensors* 2021, 9(6), 125; <https://doi.org/10.3390/chemosensors9060125>.

Titlu Fază: Modele teoretice pentru racirea vibrațională a nanorezonatorilor mecanici în regim cuantic

Termen: 09.07.2021

Obiective: Propuneri teoretice pentru scheme de racire vibrațională dinamică pe baza cuplajelor fonon-electron și/sau fonon-foton.

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

În această etapă a proiectului s-au investigat din punct de vedere teoretic diverse aspecte ale dinamicii unui nanorezonator ale cărui moduri cuantificate sunt cuplate la un subsistem. Am considerat două astfel de sisteme hibride (SH) relevante atât pentru studiul interacțiilor spin-fonon și/sau spin-foton la nivel fundamental cât și pentru aplicații în metrologie cuantică și nanofotonica:

SH_1 - Un nanotub de carbon suspendat la cele două capete și pe care a fost grefat un nanomagnet molecular descris printr-un spin localizat S. Nanotubul prezintă moduri de vibrație longitudinală (longitudinal stretching modes - LSMs) descrise în regimul cuantic prin așa-numite 'vibroni' și este cuplat suplimentar la două contacte sursă-drenă.

SH_2 - Un nanorezonator de microunde (de ex. o linie de transmisie - transmission line resonator (TLR)) ale cărui moduri cuantificate sunt cuplate în regim puternic la un sistem cuantic cu 2 nivele de tip qubit (de ex. un qubit supraconductor sau un dot cuantic).

În continuare propunem un mecanism de racire bazat pe cuplajul spin-vibron dintre un conductor mezosopic suspendat (în regim de nanorezonator) pe care se atasează un nanomagnet molecular cu spin S. Scenariul de funcționare pe care l-am investigat se bazează pe suprapunerea efectelor cuplajelor electron-vibron și spin-vibron și poate fi descris prin următoarele etape: i) la aplicarea unui bias procesele de tunelare asistate vibronic vor 'încalzi' nanorezonatorul și numărul mediu de vibroni crește, chiar dacă în starea inițială nu există cuante de vibrație; ii) în prezența cuplajului spin-vibron se activează tranziții între starea fundamentală a spinului $S_z = -S$ și stări excitate, de exemplu $S_z = -S+2$; iii) în starea de echilibru numărul mediu de vibroni va atinge o valoare *mai mică* decât în absența nanomagnetului, procesul de racire fiind asociat cu popularea stărilor excitate de spin.

Pentru studiul acestei probleme vom folosi formalismul cuantic elaborat în etapa precedentă a proiectului. Reamintim că pe baza unei ecuații master putem calcula atât curentul dependent de timp care se stabilește prin nanorezonator precum și numărul mediu de vibroni N_v și media spinului molecular $\langle S_z \rangle$. În această etapă s-a investigat evoluția sistemului prin luarea în considerare a unor tranziții de spin asistate vibronic care implică și stări excitate de spin $S_z < S$ precum și efectul alegerii unor

configuratii diferite de bias care conduc la generare de vibroni fie la tunelarea in proba (configuratie B_{in}) fie la tunelarea din proba (configuratie B_{out}).

Este de remarcat ca in literatura s-a considerat exclusiv efectul tranzitiilor de spin asociate dubletului $S_z = \pm S$. Aceasta aproximatie este justificata pentru bariere de anizotropie D suficient de mari, ceea ce corespunde unor nanomagnetii cu spin ridicat (de ex. cazul $S = 6$ considerat experimental). In contextul proceselor de 'racire' tranzitiile dintre stările cu $S_z = -S$ si $S_z = S$ sunt insa ineficiente deoarece elementele de matrice asociate sunt de ordine superioare in raport cu cuplajul spin-vibron α . Mai mult, frecventa asociata acestor tranzitii este mai mica decat frecventa anumitor moduri de vibratie ale sistemelor suspendate. Pentru cazul cel mai simplu al unui spin molecular $S = 2$ am aratat ca tranzitiile $S_z = \pm 2 \rightarrow S_z = 0$ au o probabilitate mult mai mare, elementul de matrice asociat fiind de ordinul 1 in taria cuplajului spin vibron. In plus, frecventa corespunzatoare se afla in domeniul modurilor de oscilatie longitudinale ale unui nanotub de carbon. Aceste premise asigura procese mult mai rapide asupra spinului molecular decat in cazul perechii $S_z = \pm 2$.

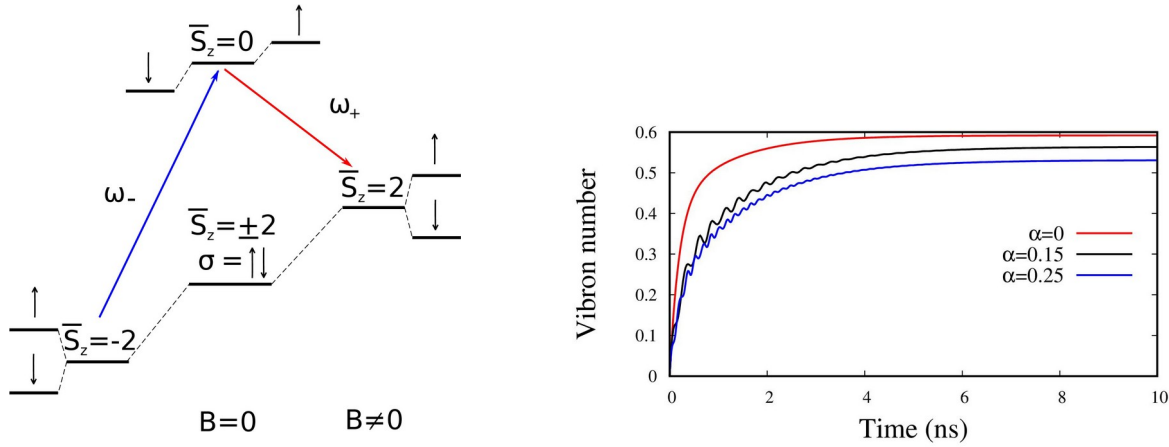


Fig. 1 Configuratia Λ a starilor uniparticula ale sistemului hibrid cu spin $S=2$ (panelul din stanga). Liniile orizontale continue reprezinta nivelele de energie in absenta vibronilor) iar sagetile indica tranzitiile dintre stari cu spin dominant $\bar{S}_z = 0$ si $\bar{S}_z = \pm 2$. Frecventele rezonante sunt ω_+ . In cazul $\omega_0 = \omega_-$ sageata albastra/rosie corespunde unei tranzitii rezonante/off-rezonante. Numarul mediu de vibroni in functie de taria cuplajului spin vibron α (panelul din dreapta).

Sa notam in continuare prin $E_{\sigma \bar{S}_z}$ energiile uni-particula ale sistemului hibrid *in absenta vibronilor*, unde σ reprezinta spinul electronului iar $\bar{S}_z$ componenta dominanta a spinului molecular; reamintim aici ca in prezenta anizotropiei transversale E componentele $|S_z\rangle$ cu aceeasi paritate se amesteca dar intrucat $E/D \ll 1$ iar campul magnetic este fixat in afara punctelor de degenerare se poate identifica pentru fiecare stare o componenta de spin dominanta. Nu este dificil de observat ca nivelele uni-particula care contribuie la tranzitii de spin asistate vibronic sunt aranjate intr-o configuratie Λ (Fig. 1), similara cu

cea intalnita in optica cuantica. Frecventele rezonante asociate fiecarei 'ramuri' sunt $\hbar\omega_{\pm} = 4D \pm 2g\mu_B B$ si sunt independente de spinul electronic σ . Este important de notat ca detuning-ul $\omega_- - \omega_+ = 4g\mu_B B$ este mult mai mic decat ambele frecvente $\omega_{\pm}$. In Fig. 1 se prezinta numarul mediu de vibroni in configuratia de bias B_{in} pentru diverse valori ale cuplajului spin-vibron α . Calculele au fost facute pentru starea initiala $|\phi_{0,-2}; N=0\rangle$ (nu exista electroni sau vibroni in sistem iar spinul molecular este in starea fundamentala $\overline{S_z} = -2$). Se observa: a) ca in starea stationara numarul de vibroni scade cu cresterea cuplajului spin-vibron, ceea ce confirma rolul nanomagnetului in racirea vibrationala; b) pentru $\alpha \neq 0$ numarul de vibroni prezinta mici oscilatii asociate cu evolutia populatiilor implicate in tranzitiile de spin - o analiza detaliata confirma analogia cu oscilatiile Rabi din optica cuantica.

Concluzii și perspective:

1. Au fost trimise spre publicare lucrarile „Spin-vibron coupling effects in single-molecule magnets grafted to a nanoelectromechanical system” (autori V. Moldoveanu, R.Dragomir) și ”Effective Hamiltonians in the Quantum Rabi Problem” (autori P. Gartner și V.Moldoveanu).
2. A fost publicata lucrarea „Self-induction and magnetic effects in electron transport through a photon cavity” (autori V Gudmundsson, NR Abdullah, CS Tang, A Manolescu, V Moldoveanu) în Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures **127**, 114544 (2021).
3. Rezultatele referitoare la transportul de caldura vor face obiectul unei publicatii viitoare.
4. Obiectivele acestei etape au fost indeplinite in totalitate. Studiile teoretice si rezultatele obtinute prezinta elemente de noutate atat la nivelul fenomenelor fizice datorate cuplajelor spin-vibron si electron-vibron cat si din punct de vedere al formalismului teoretic (in cazul cuplajului puternic spin-foton).

Titlu Fază: Sticle calcogenice de inalta performanta transparente in domeniul infrarosu pentru vedere nocturnă si termoviziune.

Termen: 09.08.2021

Obiective: Obținerea de sticle calcogenice cu punct de topire scazut, multi-banda: transparente in spectrul vizibil dar si in banda de transparenta atmosferica II (3-5 μm) si III (8-12 μm).

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

Pulberea GZSe-1 a fost sinterizata in plasma de scanteie, formandu-se astfel o pastila notata cu aceleasi indicativ: GZSe-1. Pulberea a fost introdusa intr-un cilindru de grafit cu diametrul de 16 mm, inchis la capete cu 2 dopuri de grafit prin care se realizeaza aplicarea presiunii si a curentului electric foarte intens asupra pulberii. Pentru a nu exista difuzie a carbonului in pastila (care poate afecta performantele transparente in IR prin aparitia unor linii de absorbtie a radiatiei), foite de tantal au izolat pulberea de peretii de grafit. Etanseizarea incintei s-a facut cu foite moi de grafit, plasate intre cele de tantal si peretii de grafit. Au fost realizate 3 pastile, primele 2 (Fig. 1 a si b) fiind teste de optimizare. Parametrii procesului SPS pentru pastila CZSe-1 nr. 3 (Fig. 1 c) au fost:

- **masa pulberii:** 2.6 g (pastila rezultata: grosimea ≈ 2.65 mm, diametrul ≈ 16 mm. Densitatea ≈ 4.88 g/cm³)
- **Vidul in incinta cu cilindru de grafit:** 36 Pa

	Forta aplicata	Temperatura programata	Temperatura termocuplului
min 0 ÷ min 2	3 kN	24 °C ÷ 200 °C	24 °C ÷ 200 °C
min 2 ÷ min 4	crestere liniara 3 kN ÷ 4 kN	200 °C	max 300 °C stabilizat la 200 °C

min 4 ÷ min 4:40s	creștere liniară 4 kN ÷ 7 kN	200 °C ÷ 500 °C	200 °C ÷ 450 °C
min 4:40s ÷ min 9:40s	7 kN	350 °C	max 496 °C (după 10 secunde) stabilizat la 350 °C (după 30 secunde)

Presiunea a fost prea mare, pastila produsa avand o crapatura incipienta, iar incinta de grafit a crapat. Pastila a fost slefuita cu masina de slefuit in care s-au folosit folii de smirghel de granulatatie din ce in ce mai fina (pana la 1500), iar in final s-a folosit pasla cu pasta de diamant (granulatie 0.5 si apoi 0.25). Pastila este de culoare neagra. Masurarea transmisiei radiatiei IR prin pastila ne-a indicat ca pastila e prea groasa, incluziunile cristaline de ZnSe imprastiind radiatia. Prin urmare am subtiat pana sub 1 mm grosime un fragment al pastilei (Fig. 1 c).

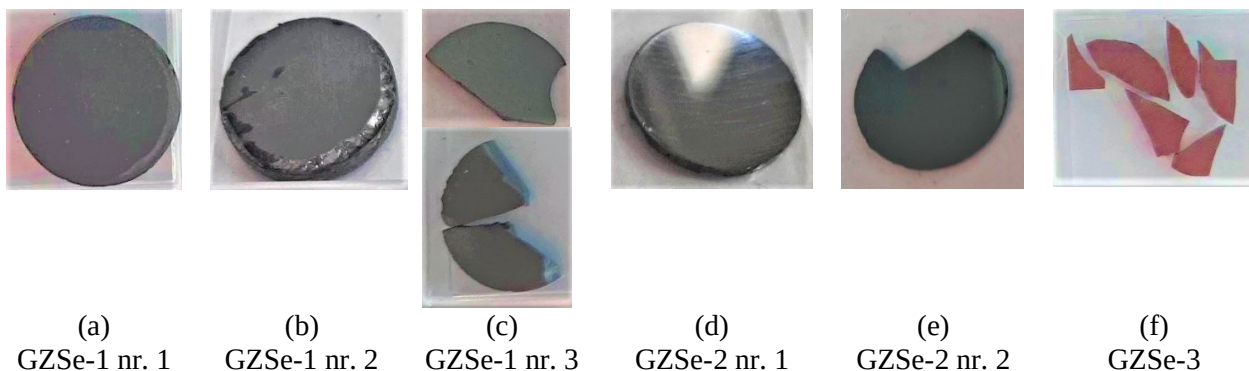


Fig. 1. Fotografii in lumina vizibila ale pastilelor produse in cadrul acestei faze. Unele pastile s-au spart in procesul de subtiere care a fost realizat pentru a mari transparenta in IR. Dimensiunile pastilelor imediat dupa producerea lor prin SPS: diametru 16 mm, grosimea ~ 2.5 mm.

Spectrul de transmisie in infrarosu (IR) pentru pastila GZSe-3 de grosime 0.4 mm este prezentat in Fig. 2. Se constata ca aceasta este transparenta intre $3.7 \div 6 \mu\text{m}$ si intre $6.5 \div 11.7 \mu\text{m}$.

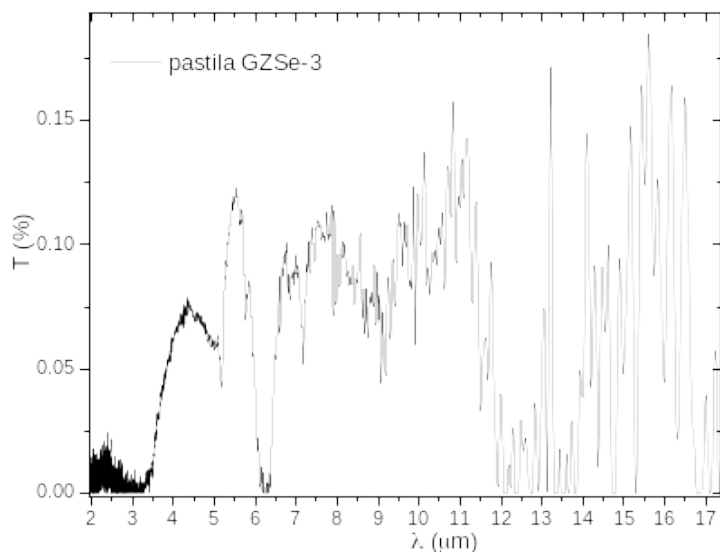


Fig. 2. Spectrul de transmisie in infrarosu (IR) pentru pastila GZSe-3 de grosime 0.4 mm

Prin urmare am atins obiectivul vizat de a crea o noua sticla transparenta in banda de transparenta atmosferica II ($3-5 \mu\text{m}$) si III ($8-12 \mu\text{m}$).

Concluzii și perspective:

- Tema fazei s-a dovedit fructuoasa si promitatoare si prin urmare liderul echipei de realizare a fazei, Dr. Alin Velea, a depus, in colaborare cu echipa condusa de Profesorul Laurent Calvez de la Universitatea din Rennes 1 din Franta, la competitia M-Era.net de anul acesta, proiectul cu titlul „**High refractive index MID-IR transparent chalcogenide glass-ceramics for Nonlinear Optics**”, care va continua cercetarea utilizand experienta dobandita in cadrul acestei faze.
- De asemenea pentru a micsora procentul fazei de c-ZnSe si elimina porii specifici sinterizarii SPS responsabili de imprastierea radiatiei IR si astfel de scaderea drastica a transparentei IR in pastile (materialul GZSe-3 fiind perfect pentru vedere nocturnă si termoviziune), se pot produce straturi subtiri din materialul GZSe-3 prin pulverizare cu magnetron (in engleza: magnetron sputtering) sau prin ablatie laser pulsata (in engleza Pulsed Laser deposition) a pastilelor corespondente.

Titlu Fază: Influenta micilor deformari ale structurii cristaline asupra proprietatilor magnetice si semimetalice in compusii Heusler

Termen: 09.08.2021

Obiective: Se urmareste analiza efectului micilor deformari (concretizate atat prin modificari unghiulare cat si ale parametrilor de retea) ale structurii cristaline tipice asupra structurii electronice, a proprietatilor semimetalice si a comportamentului magnetic in cazul unor compusi Heusler noi, pentru utilizarea lor potentiala ca materiale componente sub forma de substraturi in heterostructuri epitaxiale.

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

Motivat de problemele frecvent aparute in procesul de fabricatie, precum imperfectiunile din procesul de crestere al heterostructurilor epitaxiale, rezultatele publicate, mentionate anterior au reprezentat punctul de plecare pentru prezentul studiu pe compusul Zr_2CrAl . Astfel, s-au urmarit modificarile aparute in structura electronica si proprietatile semi-metalice respectiv magnetice in cazul in care structura cristalina este:

1. cubica (grup spatial F-43m - cubic all face centred) dar volumul celulei unitate scade cu -5%, -3%, -1%, respectiv creste +1%, +3%, +5%.
2. deformata tetragonal (grup spatial I-4m2 – tetragonal body centred) iar raportul parametriilor de retea, c/a scade cu -4%, -2%, respectiv creste cu +2%, si +4%. In plus, modificarea volumului celulei unitate s-a realizat similar structurilor de la punctul 1.
3. deformata ortorombic (grup spatial F222 – orthorhombic – all face centred) pentru care volumul celulei unitate este similar cu volumul optim al celulei unitate, avand structura cristalina cubica sau variaza ca la punctul 1, raporturile dintre parametrii de retea fiind $b/a=a/c=0.98$; $a \neq b \neq c$ iar $\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$
4. deformata romboedrala (grup spatial R3m – rhombohedral) pentru care variatiile volumului au fost similare celor de la punctul 1 iar raporturile $c/a=2.46$; $a=b$ si $\alpha=\beta=90^\circ$ $\gamma=120^\circ$

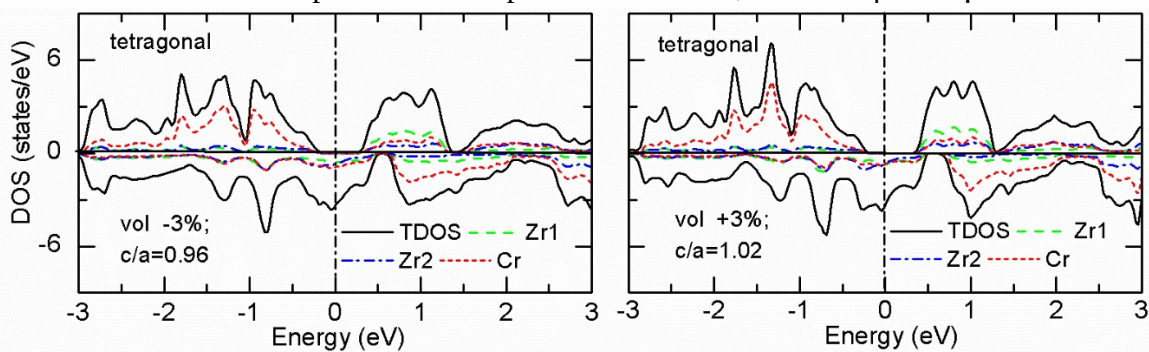


Figura 1 Densitatile de stari, totale si partiale pentru compusul full-Heusler Zr_2CrAl , avand structurile cristaline deformate tetragonal cu un raport al parametrilor de retea $c/a=0.96$ (stanga) sau $c/a=1.02$ (dreapta) si cu o descrestere a volumului celulei elementare de -3% (stanga) si respectiv o crestere a volumului optim al celulei unitate de +3% (dreapta)

In Figura 1 au fost ilustrate densitatile de stari pentru doua cazuri din cele studiate avand structura cristalina deformata tetragonal. Asa cum se poate observa, compusul Zr_2CrAl prezinta proprietati semi-metalice cu o banda interzisa de aproximativ 0.35eV, pozitionata in jurul nivelului Fermi, in banda purtatorilor de spin minoritari. In banda purtatorilor de spin majoritari, apar densitati de stari nenule avand energie Fermi, determinand astfel caracterul metalic al benzii „spin-down”.

Volumul celulei unitate a fost pastrat similar ca si in cazurile calculelor cu structura cristalina cubica, astfel ca au putut fi comparate momentele magnetice totale per formula unitate in aceste cazuri. Rezultatele teoretice au demonstrat ca acest compus Zr_2CrAl ramane un semi-metal ferimagnetic cu un moment magnetic total egal cu cel pentru structura cristalina cubica de $1 \mu_B/\text{f.u.}$ rezultat din cuplajul feromagnetic al celor doi atomi de zirconiu situati pe pozitii neechivalente in cele doua subretele si cuplajul ferimagnetic mai puternic dintre atomii de Zr si cei de Cr. Astfel in cazul structurii deformate tetragonal a carei volum a fost cu 3% mai mic decat cel optim si pentru care raportul parametriilor de retea $c/a=0.96$; $a=b$ (Fig 1 –panelul stang) momentele magnetice calculate pentru atomii de Z 1 si Z 2 au fost $-0,57 \mu_B$, respectiv $-0,40 \mu_B$ in timp ce momentul magnetic partial calculat pentru Cr a fost $2,28\mu_B$.

In cazul in care structura cristalina cubica a fost deformata ortorombic, s-a obtinut o celula unitate cu acelasi volum ca in cazul 1, dar parametrii de retea diferiti intre ei, raporturile dintre acestia fiind $b/a=a/c=0.98$. Avand in vedere ca unghiurile iar α , β si γ sunt similare structurilor cubice si tetragonale, scopul acestor modelari a fost acela de a observa in ce masura proprietatile semi-metalice si magnetice se modifica atunci cand parametrii de retea difera complet unul de celalalt.

Concluzii și perspective:

Proprietatile semi-metalice si magnetice ale compusului Zr_2CrAl au fost analizate avand la baza Teoria Functionalei de Densitate (Density Functional Theory DFT), folosind metoda de aproximare a gradientului generalizat (Generalized Gradient Approximation GGA) cu Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) pentru potentialul de schimb - corelatie implementata in programul de calcul Wien2k.

Celula unitate a compusului Zr_2CrAl , raportata in literatura ca fiind optima energetic are o structura cristalina cubica. In cadrul acestui studiu, structuri cubice mai sus amintite i s-au aplicat deformari tetragonale, ortorombice si romboedrale pentru a analiza stabilitatea cuplajului ferimagnetic si al proprietatilor semi-metalice ale compusului, utile in cazul depunerii acestui aliaj ca strat integrat in heterostructurile depuse epitaxial, mai ales al acelor care necesita un grad redus de toxicitate.

S-a demonstrat ca in cazul tuturor deformatiilor luate in considerare, aliajul Zr_2CrAl isi pastreaza proprietatile ferimagnetice, datorate cuplajului dintre atomii de Zr si cei de Cr. care genereaza un moment magnetic total, ce respecta regula Slater-Pauling, tipica compusilor cu proprietati semi-metalice, avand polarizare inalta de spin.

Continuarea proiectului presupune analiza detaliata si a altor compusi din clasa aliajelor Heusler, care prezinta proprietati magnetice si semi-metalice si pot fi considerati potentiali candidati in aplicatii spintronice.

Titlu Fază: Dinamica anomala a vortexurilor in monocristale de pnictid dopat isovalent BaFe₂(As_xP_{1-x})₂

Termen: 09.08.2021

Obiective: Investigarea experimentală și teoretică a unor monocristale de pnictid dopat isovalent BaFe₂(As_xP_{1-x})₂ printr-o serie de investigații la temperaturi joase și câmpuri magnetice intense. Astfel, din măsurătorile de magnetizare DC se vor determina densitățile critice de curent în funcție de temperatura și câmp precum și evoluția SMP. Din măsurătorile de susceptibilitate magnetică în funcție de temperatura, câmpul magnetic DC, câmpul alternativ de excitație și frecvență, precum și din curbele de relaxare magnetică în diverse condiții, se vor obține informații privind diversele regimuri de dinamică a vortexurilor, tipul de creep elastic sau plastic, marimile manunchiurilor de vortexuri și influența centrilor pinning.

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

Pentru atingerea obiectivelor fazei se preconizează fabricarea în colaborare cu grupuri partenere din Japonia, de la Universitatea Tokyo și de la AIST Tsukuba de monocristale de pnictid dopat isovalent BaFe₂(As_xP_{1-x})₂, având diverse dopaje. După examinarea calității monocristalelor vor fi efectuate o serie de investigații la temperaturi joase și câmpuri magnetice intense. Astfel, din măsurătorile de magnetizare DC se vor determina densitățile critice de curent în funcție de temperatura și câmp precum și evoluția SMP. Din măsurătorile de susceptibilitate magnetică în funcție de temperatura, câmpul magnetic DC, câmpul alternativ de excitație și frecvență, precum și din curbele de relaxare magnetică în diverse condiții, se vor obține informații privind diversele regimuri de dinamică a vortexurilor, tipul de creep elastic sau plastic, marimile manunchiurilor de vortexuri și influența centrilor pinning. Din măsurători de susceptibilitate multiarmonică se vor determina liniile de topire ale vortexurilor indicate de apariția semnalului armonic în răspunsul materialului la excitații în câmp alternativ. Din rezultatele măsurătorilor sus-menționate și din analiza teoretică a datelor experimentale se vor determina caracteristicile principale ale sistemului de vortexuri în aceste materiale, dinamica lor în diverse condiții și în relația cu centri pinning. Vom căuta în literatura modele teoretice plauzibile care să explice credibil anomaliile observate în studiile preliminare pe unele monocristale din aceeași familie. Se vor obține informații privind posibilă fructificare a dinamicii anormale a vortexurilor în aplicații practice.

(BaFe₂(As_{0.67}P_{0.33})₂) (P-Ba122od)

În cazul măsurătorilor DC, rezultatele au arătat că, în cazul acestui monocristal supradopat, densitatea critică de curent este mai mică decât în cazul P-Ba122ud și P-Ba122op, iar SMP este translatat spre câmpuri mai mari, mai aproape de linia de ireversibilitate. Foarte spectaculoasă este apariția unor intersecții ale curbelor izoterme de histerezis magnetic, un fenomen extrem de rar. Un aspect unic descoperit de noi în acest monocristal este apariția unui "umar" ciudat în curbele de magnetizare, care conduce la o formă de pară a curbelor de hysteresis. Pentru a explica acest fenomen ne-am referit la o teorie care încerca să explice SMP printr-o tranziție structurală romb-patrat (RST- rhomb-to square transition) a sticlei de vortexuri Bragg în supraconductorii cu simetrie de ordinul patru. Măsurătorile noastre DC, corelate cu cele de relaxare magnetică și de susceptibilitate AC au arătat că RST nu generează SMP, dar această tranziție structurală poate influența câmpul de onset (dependent de pinning) a SMP când acest câmp este apropiat de linia RST intrinsecă, prin apariția aceluși umar în curbele de histerezis magnetic $m(H)$. Evoluția cu temperatură a umarului în $m(H)$ duce la intersecții ale curbelor izoterme $m(H)$, și, în consecință, la un peak secundar în variația cu temperatură a densității critice de curent DC, $J_c(T)$. Aceste măsurători și interpretări au demonstrat că apariția umarului în curbele $m(H)$ în DC este un efect al unei proliferări accelerate, induse de pinning, a dislocațiilor când modulul de compresie elastică a BVG scade la tranziția structurală între o simetrie rombică și una patră parțial distorsionată a BVG. Dezordonarea sistemului de vortexuri indusă de pinning continuă și deasupra domeniului RST, și reprezintă mecanismul de bază al efectului SMP și pentru supraconductorii cu simetrie de ordinul patru [10].

Mult mai interesante au fost în acest monocristal măsurătorile de susceptibilitate AC, efectuate cu mai multe amplitudini și frecvențe ale câmpului magnetic de excitație, în diverse câmpuri magnetice DC. Un exemplu este prezentat în Fig. 1, pentru $H_{DC} = 1$ T, $h_{AC} = 1$ Oe și $f = 9997$ Hz.

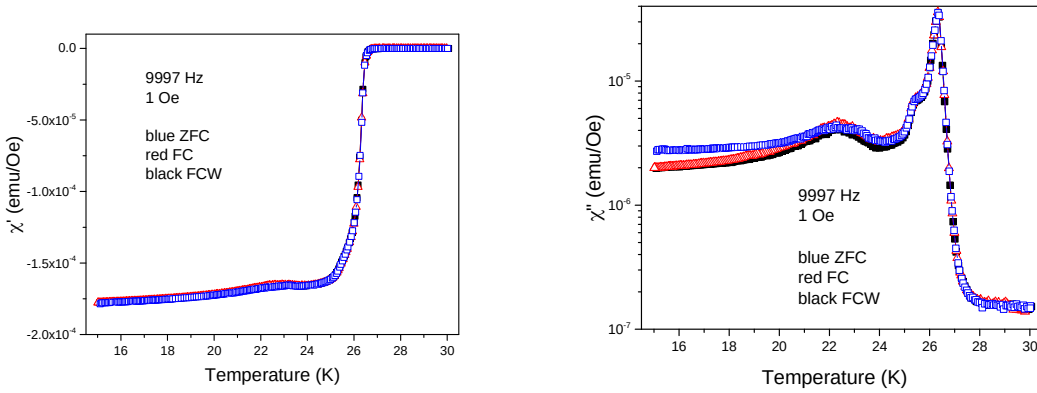


Fig. 1. Dependenta de temperatura a susceptibilitatii AC in-faza (stanga), si, respectiv, in opozitie de faza (dreapta, scala logaritmica), a P-Ba122od, in $H_{DC} = 1$ T, $h_{AC} = 1$ Oe si $f = 9997$ Hz.

Concluzii și perspective:

- Au fost studiate diverse proprietati supraconductoare de baza si a fost aprofundat studiul dinamicii sistemului de vortexuri intr-un nou material supraconductor pnictid dopat isovalent, $BaFe_2(As_{1-x}P_x)_2$ (P-Ba122), cu diverse concentratii de fosfor: probe sub-dopate (P-Ba122ud), x nominal 0.28, ($BaFe_2(As_{0.72}P_{0.28})_2$), avand temperature critica $T_c \sim 28$ K; probe optim dopate (P-Ba122op), x nominal 0.30, ($BaFe_2(As_{0.7}P_{0.3})_2$), avand temperature critica $T_c \sim 29$ K; si, respectiv, probe usor supra-dopate (P-Ba122od), x nominal 0.33, ($BaFe_2(As_{0.67}P_{0.33})_2$), avand temperatura critica $T_c \sim 27.5$ K.
- Au fost determinate densitatilecritice de curent in cadrul modelului Bean din curbele de histerezis magnetic DC la temperatura $T \sim T_c/2$ si $H = 10$ kOe este circa 10^5 A/cm² pentru P-Ba122ud, putin mai mic in cazul P-Ba122op, si semnificativ mai mic in cazul P-Ba122od.
- Din masuratori DC am constatat existenta unui al doilea maxim in magnetizare (SMP, second magnetization peak) cu cresterea campului magnetic aplicat H , acest peak avand un camp de onset H_{on} si un camp la care apare maximul H_p , ambele situate mult sub linia de ireversibilitate, si conducand la curbele de histeresis magnetic DC $m(H)$ cu forma de coada de peste.
- Am adus dovezi concludente in sprijinul mecanismului care explica SMP printr-o dezordonare indusa de pinning a solidului de vortexuri quasi-ordonat la campuri mici (sticla de vortexuri Bragg, BVG, care este stabila la formarea de dislocatii). Deoarece SMP se extinde pe un interval mare de camp magnetic, am demonstrat ca dezordonarea BVG indusa de pinning este continua, incepand la H_{on} , unde energia pentru deformarea plastica a vortexurilor este mai mica decat energia efectiva de pinning, si terminandu-se la H_p unde sistemul de vortexuri devine amorf. Aspectul esential este proliferarea dislocatiilor in sistemul de vortexuri pentru H intre H_{on} si H_p (intai la distante mari), unde cresterea pinningului este datorata unei acomodari mai eficiente a vortexurilor pe centri pinning in prezenta dislocatiilor in retea de vortexuri, lucru confirmat si de cross-over-ul intre vortex-creep-ul elastic si cel plastic de-a lungul SMP.
- Pentru probele dopate optim si subdopate, masuratorile AC in regiunea de SMP in DC au aratat ca nu exista variatii non-monotone a componentei in-faza (de ecranare) m' , lucru care era de asteptat in cazul acestor doua probe care nu au curbe de histerezis magnetic care se intersecteaza. O variatie non-monotona, in legatura cu SMP, a fost obtinuta doar pentru dependenta de campul DC in procedura ZFC a componentei in-opozitie de faza (disipativa) m'' a momentului magnetic AC neliniar.
- Pentru proba supra-dopata SMP este translatat spre campuri mai mari, mai aproape de linia de ireversibilitate. Foarte spectaculoasa este aparitia unor intersectii ale curbilor izoterme de histerezis magnetic, un fenomen extrem de rar. Un aspect unic descoperit de noi in acest monocristal este aparitia unui “umar” ciudat in curbele de magnetizare, care conduce la o forma de para a curbilor de

hysteresis, si care este foarte probabil legat de o tranzitie structurala rombic-patrat (RST- rhomb-to square transition) a sticlei de vortexuri Bragg in supraconductorii cu simetrie de ordinal patru.

- Am demonstrat ca aparitia umarului in curbele $m(H)$ in DC este un efect a unei proliferari accelerate, induse de pinning, a dislocatiilor cand modulul de compresie elastica a BVG scade la tranzitia structurala intre o simetrie rombica si una patrata partial distorsionata a BVG. Dezordonarea sistemului de vortexuri indusa de pinning continua si deasupra domeniului RST, si reprezinta mecanismul de baza a efectului SMP si pentru supraconductorii cu simetrie de ordin patru.
- Tot in proba supra-dopata, masuratorile de susceptibilitate AC au aratat trecerea de la regimul Campbell al vortexurilor la valori mici ale campului magnetic alternativ de excitatie, la o dinamica anomala a vortexurilor la campuri de excitatie mai mari. Valorile absolute ale minimului secundar in curentul de ecranare si a maximului secundar al disiparii cresc cu cresterea h_{AC} , dar variatia pozitiei lor in functie de campul magnetic DC aplicat este diferita: cu cresterea h_{AC} pozitia modulului minimului secundar al curentului de ecranare se deplaseaza spre valori mai mari ale H_{DC} , in timp ce pozitia maximului secundar in disipare se deplaseaza spre valori mai mici ale H_{DC} .
- Linia de topire a vortexurilor determinata prin masuratori de susceptibilitate multiarmonica a aratat ca sistemul P-Ba122 este foarte robust, fiind potrivit pentru aplicatii practice la campuri magnetice mari.
- Opinam ca obiectivele fazei au fost realizate in totalitate. Rezultatele si concluziile obtinute in cadrul fazei au fost prezentate in cadrul unor conferinte interne si internationale, un articol este publicat in Scientific Reports 10, 17274 (2020), <https://doi.org/10.1038/s41598-020-74156-z>, iar un al doilea articol este in preparare.
- In viitor ne propunem sa continuam cercetarile pe aceasta directie a materialelor supraconductoare pe baza de fier, in special un material descoperit foarte recent, $\text{CaKFe}_4\text{As}_4$.

Titlu Fază: Metode avansate de cartografiere in spatiul direct si spatiul reciproc la scala nanometrica cu fascicul de electroni

Termen: 09.09.2021

Obiective: Implementarea in premiera pe plan national a doua tehnici avansate de caracterizare morfostructurala a materialelor la nivel nanometric cu ajutorul microscopului electronic prin transmisie: tomografia cu fascicul electronic si cartografia structurala cu fascicul electronic in precesie.

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

Au fost dezvoltate si optimizate doua metodologii de lucru privind doua tehnici avansate de microscopie electronica prin transmisie, tomografia cu electroni, respectiv cartografierea cristalografica. Dezvoltarea acestor metodologii este considerata esentiala pentru mentinerea competitivitatii Institutului National de Cercetare-Dezvoltare pentru Fizica Materialelor la standardele Uniunii Europene.

Tomografia cu electroni extinde functionalitatea microscopiei electronice prin transmisie conventionale prin posibilitatea de a observa sisteme nanodimensionate de interes nu doar prin simple imagini (proiectii 2D), ci prin imagini 3D ce caracterizeaza complet sistemul din punct de vedere morfologic. Aceste tipuri de imagini sunt cunoscute sub denumirea de tomograme si sunt obtinute prin analiza automatizata a unei serii de perspective 2D asupra unei zone investigate. Asadar, obtinerea tomogramelor implica atat infrastructura experimentală specifica pentru achizitia seriilor experimentale precum si metode avansate de procesare de imagini pentru obtinerea de imagini 3D.

Optimizarea metodologiei de analiza 3D se refera atat la procedura de achizitie de imagini cat si la procesarea de imagini.

Optimizarea achizitiei de imagini a fost realizata folosind microscopul electronic prin transmisie JEM 2100, echipat cu piesa polara de inalta rezolutie si holder cu posibilitate de rotatie in jurul axei de cca 160 deg. Optimizarile au fost realizate in modul de lucru STEM (microscopie electronica prin transmisie cu fascicul cu baleiaj), folosind programele proprietare JEOL.

Este de precizat faptul ca pregatirea probei in vederea investigatiilor de tomografie este esentiala. Astfel, grilele de microscopie trebuie sa aiba un caroiat mai rar (200 mesh Cu grid s-a gasit a fi optim). De asemenea,

pentru facilitarea post-procesarii, pe grila de microscopie este indicat sa se aseze markeri de Au (au fost folositi cu succes markeri de 5 nm, sferici, pentru imagistica la mariri mai mari de 400kx).

Pentru fiecare sistem investigat in parte, este necesara gasirea unei combinatii optime intre limitele unghiulare de rotatie, pasul de rotatie, viteza de scanare a imaginilor, viteza de achizitie, precizia de focalizare. Pentru majoritatea sistemelor investigate s-a observat ca urmatoarea combinatie de parametri ofera rezultate bune:

1. serie unghiulara de la -70 la 70 deg;
2. pas de 1 deg;
3. viteza focalizare mare, folosind rezolutie mai mica a imaginii (binning 2 si speed 2);
4. precizia de focalizare maxima;
5. plaja de focalizare intre -1600 nm si +1600 nm;
6. stabilizarea imaginii si corectia de drift se realizeaza pe imagini cu rezolutie mica (binning 2) si cu timp de achizitie mic (speed 2);
7. pentru imaginile finale, viteza de scanare medie (speed 3) sau mica (speed 4).

Optimizarea post procesarii seriei de imagini.

Folosind seria experimentală de imagini, se realizează alinierea acestora și procesul de reconstrucție 3D. Pentru aliniere se folosesc diverse variante ale metodei de corelație încrucișată (cross-correlation). Pentru reconstrucție există mai multe metode, cea mai simplă, rapidă și de multe ori cu rezultate satisfăcătoare fiind FBP (Filtered Back Projection). Mai sunt de menționat și metode iterative de reconstrucție, precum SIRT, SART.

Există o multitudine de programe prin care se pot realiza operații de aliniere și reconstrucție (precum și o multime de alte operații cu imagini): JEOL-Compozer, Tomviz, Fiji, IMOD, tomo3d, Genfire, etc.

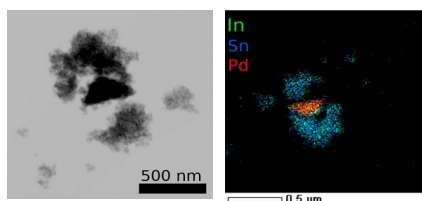
Au fost încercate diverse variante de obținere a tomogramelor, toate cu rezultate bune (Fig. 1, Fig. 2, Fig. 3).

În ceea ce privește optimizarea procesării seriei de imagini, următoarele etape au fost identificate ca fiind optime:

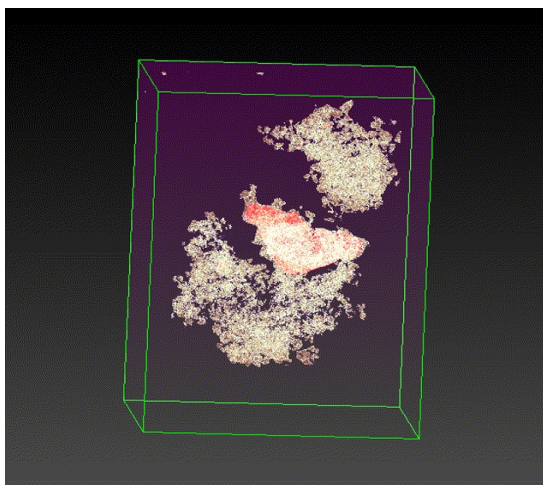
1. aliniere și filtrare preliminară folosind Tomviz;
2. reconstrucție folosind Genfire (ideal folosind oversampling 3, când permite puterea de calcul);
3. segmentare și vizualizare folosind Tomviz.

Câteva exemple de reconstrucții 3D realizate în cadrul acestui studiu sunt prezentate mai jos:

- a) Tomografii obținute pe sisteme nanostructurate de $\text{SnO}_2\text{-In}_2\text{O}_3$ dopat cu Pd, pentru senzori de gaze. Tomografia cuplată cu hărți elementale a arătat distribuție 3D a Pd, segregat în clusteri de dimensiuni mari (200 nm).



*Fig1. Imagine STEM
(stanga), harta elementala
(mijloc), reconstrucție 3D
(dreapta)*



- b) Tomografii obținute pe sisteme $\text{SnO}_2\text{-ZnO}$ dopate cu Pd, pentru senzori de gaze. Tomografie cuplată cu hărți elementale a arătat distribuție 3D a Pd, segregat în clusteri de dimensiuni medii (50 nm).

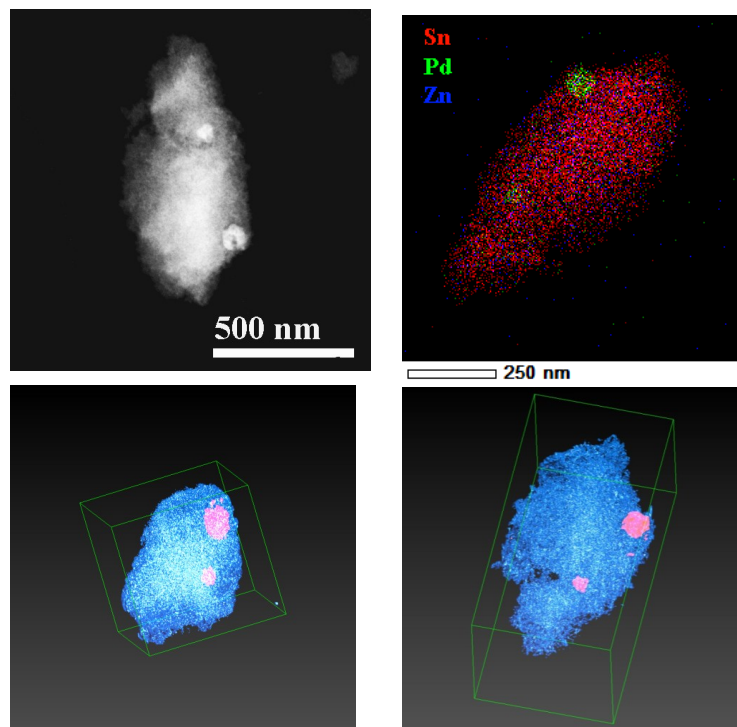


Fig2. In sensul acelor de ceasornic: Imagine STEM , harta elementală, perspective reconstrucții 3D.

Concluzii și perspective:

În urma desfășurării fazei, se remarcă următoarele rezultate obținute, în strictă corelație cu obiectivele propuse:

- a) a fost găsit un set optim de parametri experimentali pentru achiziția de serii tomografice (folosind echipamentul JEM 2100);
- b) a fost găsit un set optim de parametri pentru achiziția de nanodifracțiuni folosind echipamentul ASTAR;
- c) a fost găsită o metodologie optimă de obținere a tomogramelor de electroni, ceea ce a permis obținere de informații 3D relevante, pe sisteme nanodimensionate cu aplicații în senzorială (materiale pe bază de SnO_2);
- d) a fost găsită o metodă optimă de procesare a datelor provenite de la sistemul ASTAR, realizându-se astfel cu succes cartografieri de faze și orientări cristalografice pe sisteme nanodimensionate (B_4C și eutectic $\text{LaB}_6\text{-TiB}_2$).

O parte din rezultatele obținute de-a lungul acestui studiu au fost utilizate pentru realizarea următoarelor brevete și publicații:

1. Low temperature CO sensing under infield conditions with In doped Pd/SnO_2 , A. Stanoiu, C. Ghica, S. Somacescu, A. C. Kuncser, A. M. Vlaicu, I. F. Mercioniu, O. G. Florea, C. E. Simion, *Sensors & Actuators B*, 308 (2020) 127717;
2. Partially-oriented MgB_2 superconducting bulks with addition of B_4C and cubic BN obtained by slip casting under high magnetic field and spark plasma sintering, M. A. Grigoroscuta, G. Aldica, I. Pasuk, M. Burdusel, V. Sandu, A. Kuncser, T. S. Suzuki, O. Vasyukiv, P. Badica, *Mat. Res. Bul.* 134 (2021) 111103;
3. o cerere de brevet (RO134774-A0);
4. o cerere de brevet trimisă spre evaluare.

În concluzie, obiectivele propuse au fost integral implementate.

În ceea ce privește dezvoltarea în continuare a subiectului, există perspective de a contribui la domeniul de post procesare al tomogramelor precum și al hartilor de orientare prin dezvoltarea în INCDFM de noi pachete software cu funcționalități inovatoare.

Titlu Fază: Dinamica moleculară a unor sisteme anizotrope de tip cristal lichid termotrop, în compozite cu semiconductori oxidici sintetizați prin metode ecologice

Termen: 11.10.2021

Obiective: obținerea de cunoștințe despre tipuri de sisteme moleculare anizotrope-cristale lichide discotice și compozite ale acestora cu semiconductori oxidici sintetizați prin metode ecologice.

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

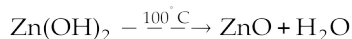
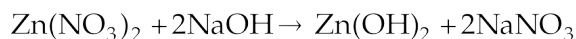
Prepararea probelor; i) prepararea extractului de cuișoare

Cantitatea de 10 g pudră de cuișoare a fost adăugată în 50 mL apă distilată. Suspensia se fierbe 5 min, apoi se răcește la temperatura camerei și se filtrează folosind hârtia de filtru (Whatman filter paper no.1). Astfel, este obținut extractul apos de cuișoare.

Extractul apos a fost folosit în experimentele ulterioare, de obținere a oxidului de zinc (ZnO).

ii) generarea microparticulelor de ZnO prin reacția chimică dintre $\text{Zn}(\text{NO}_3)_2$ și NaOH, în prezența extractului apos/alcoolic de cuișoare

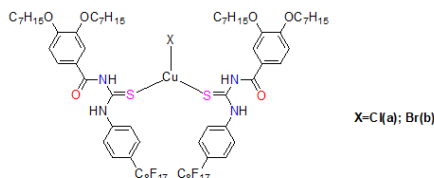
Extractul de cuișoare, diluat cu apă bidistilată în proporție de 1:1 reprezintă soluția A. Precursorii (Merck), $\text{Zn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ (0.5M) și NaOH (1M) au fost dizolvați în apă distilată (agitare continuă), obținându-se soluțiile B și, respectiv C. Ulterior, soluțiile B și C au fost adăugate prin picurare în soluția A (agitare continuă timp 30 minute). Precipitatul a fost centrifugat și spălat de câteva ori până la atingerea unui pH neutru și în final a fost uscat în vid la temperatura de 100°C timp de 2 ore. Pulberea obținută a fost indexată ZnO. Sinteza structurilor de ZnO implică următoarele reacții chimice:



iii) realizarea compozitelor pe bază de cristal lichid discotic Cu10JMMA și ZnO

Cristale lichide discotice pe bază de complexe de cupru (I) în stare de coordinație trei, cu derivați de benzoiltiourea – Cu10JMMA. Important, organizarea complexă nanosegregată a acestui tip de cristale lichide poate oferi nanocanale 1D pentru transport ionic, în special conducerea protonilor cu o gamă largă de aplicații atractive în membranele de schimb de protoni (PEM) sau alte dispozitive electro-optice și legate de energie. Structura moleculară a cristalului lichid discotic folosit este dată în schema 1.

Pentru realizarea probelor, suspensia DCL-ZnO a fost preparată prin adăugarea unor cantități diferite de ZnO în DCL. În amestecuri a fost adăugat cloroform cu scopul de a omogeniza mai ușor suspensia. Dispersiile omogene de DCL-ZnO au fost obținute prin aplicări succesive de ultrasunete (Hielscher Ultrasonics, puterea de 250 wați și frecvența de 24kHz) și de treceri în faza izotropă timp de 1 oră (agitator magnetic cu plită termostatabilă). Amestecul a fost apoi depus prin „drop casting” pe electrodul de măsură, proba fiind menținută la temperatura camerei timp de 24 de ore, cu scopul de a îndepărta urmele de cloroform. În notațiile compozitelor au fost menționate procente masice ale celor doi componente (Cu10JMMA și ZnO).



Schema 1. Structura moleculară Cu10JMMA

Difractograma probei ZnO pur prezentata in Figura 1a) releva maxime la 31.8°, 34.7°, 36.3°, 47.6°, 56.6°, 62.9°, 66.4°, 67.9° și 69.1° corespunzand indicilor Miller ai planelor (100), (002), (101), (102), (110), (103), (200), (112) si (201). Toate maximele de difracție observate sunt atribuite ZnO in fază hexagonală de wurtzite (JCPDS nr. 01-082-9745) confirmand obtinerea de ZnO. Imaginile SEM (Figura 1b)) evidentiaza particulele de ZnO sub forma de particule sferice (dimensiunea medie de ~100nm pentru ZnO). Cartografierea EDS (Figura 2) evidentiaza distributia elementelor O, Zn si C, hartile elementale confirma prezenta ZnO. Pe baza datelor de reflexie a fost reprezentata grafic functia Kubelka-Munk ($f(R) = (1 - R)^{1/2} / 2R$) (Figura 3), din aceasta fiind estimata valoarea benzii interzise a ZnO la $\sim 3.3\text{eV}$ pentru proba ZnO valoarea fiind în acord cu datele din literatura raportate pentru diferite morfologii ale ZnO (nanofire obtinute prin oxidare termica sau hidrotermal). Interactiunea moleculelor de DCL cu suprafata particulelor de ZnO a fost investigata prin FTIR (Figura 4). Compozitele sunt stabile la temperatura camerei, frecvențele IR fiind corelate cu cele obtinute pentru materialele pure. Sunt vizibile mai multe regiuni in spectrele FTIRale probelor compozite. Astfel, la $3200\text{--}3400\text{ cm}^{-1}$ pentru $\nu_{\text{N-H}}$, la $1500\text{--}1700\text{ cm}^{-1}$ pentru $\nu_{\text{C=O}}$ si $\nu_{\text{C-N}}$ si, in final, la $1100\text{--}1250\text{ cm}^{-1}$ unde se pot gasi benzi de absorbtie puternice atribuite unei combinatii de frecvente de intindere $\nu_{\text{C-N}}$ si ν_{fenil} . Spectrele FTIR ale ZnO pur si ale compozitelor cu DCL evidentiaza banda specifica oxidului de zinc de la 455 cm^{-1} .

Pierdere în greutate datorată arderii și descompunerii moleculelor organice a fost investigata prin masuratori DSC-TG. Curbele TG ale probei de ZnO pur sunt prezentate in Figura 5 ($20 - 800\text{ }^{\circ}\text{C}$), procentul total de pierdere a masei fiind de 16%. Pierdere inițială în greutate observată sub $200\text{ }^{\circ}\text{C}$ corespunde pierderii conținutului de apă adsorbit pe suprafața probei. Intervalul $400\text{--}500\text{ }^{\circ}\text{C}$ corespunde eliberării compușilor anorganici din probă. În etapa finală (intervalul $700\text{--}800\text{ }^{\circ}\text{C}$), pierdere în greutate a probei este foarte mică. În analiza DGA atat a probelor compozite cat si a ZnO pur există un vârf exoterm care ar putea indica existența unui material organic în cantitate mică. În cazul probelor compozite Cu10JMMA-ZnO, procentele totale de pierdere a masei, au fost de 9% pentru proba Cu10JMMA 1%-ZnO 99%, respectiv de 20% pentru proba Cu10JMMA 95%-ZnO 5%.

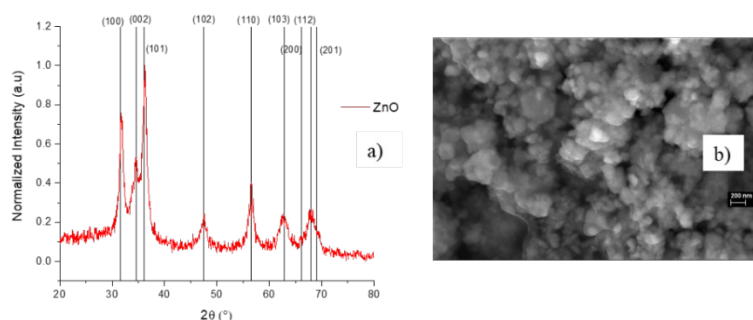


Figura 1.
a) Difractograma XRD
si b) Imaginea SEM a
ZnO pur.

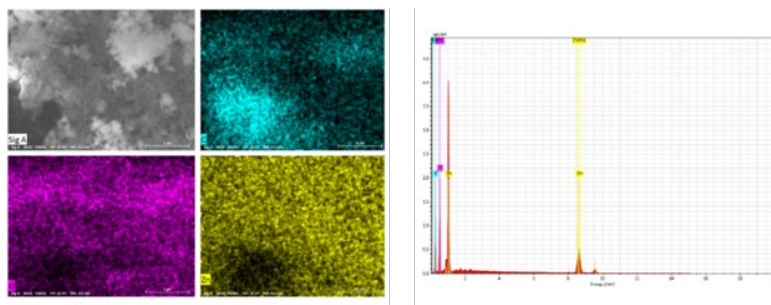


Figura 2.
Cartografierea EDS a
probei de ZnO pur.

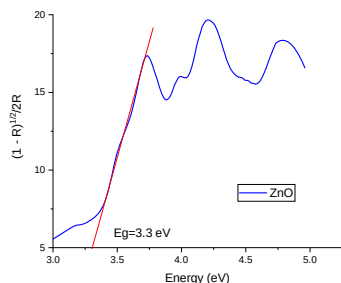


Figura 3.
Reprezentarea funcției
Kubelka-Munk pe de
ZnO pur.

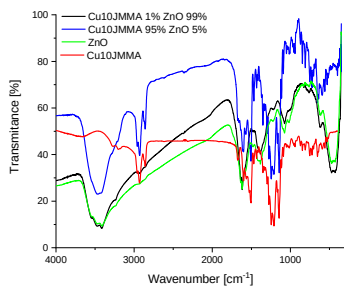


Figura 4. Spectre FTIR
corespunzatoare
probelor pure si
compozite.

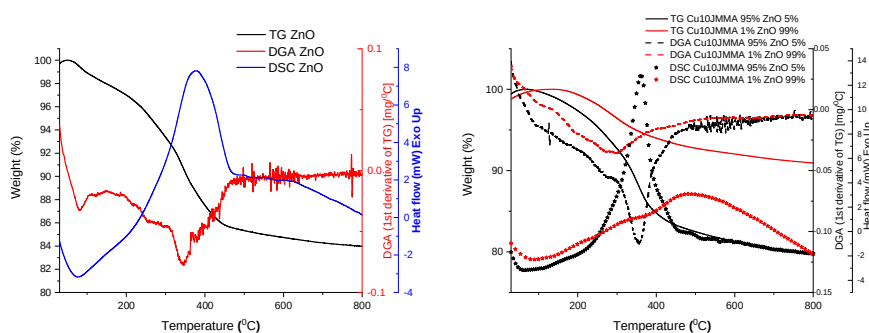


Figura 5. Curbele TG,
DGA si DSC ale
probelor investigate.

Concluzii și perspective:

În concluzie în cadrul fazei, au fost obținute următoarele rezultate:

- Difractograme XRD ale probelor de ZnO sintetizate.
- Imagini SEM pentru analiza morfologică, harti EDX și spectre aferente pentru a identifica distribuția elementelor chimice pe suprafața probelor de ZnO sintetizate.
- Spectre UV-Vis și FTIR pentru proprietăți optice ale probelor de ZnO sintetizate.
- Proprietățile dielectrice/electrice ale compozitelor Cristal lichid discotic și particule de ZnO au fost studiate în funcție de frecvență și de temperatură prin Spectroscopie dielectrică. Forma spectrelor marimilor electrice este complexă și prezintă o mare variabilitate de la o probă la alta. Ca urmare a fost dezvoltată o metodă matematică proprie de prelucrare numerică a spectrelor cu ajutorul derivatei logaritmice. Metoda este generală, este independentă de vreun model fizic, se aplică în mod special analizei proceselor de relaxare extinse și suprapuse în prezența unei conductivități electrice importante. Frecvența caracteristică se obține cu o bună precizie, fiind singurul parametru luat în considerare pentru mecanismele de relaxare. Astfel, compozitele Cu10JMMA-ZnO prezintă frecvența caracteristică ce respectă legea Vogel-Fulcher-Tammann; valorile acestei frecvențe au tendința de creștere cu creșterea concentrației de DCL; constanta corespunzătoare energiei de activare crește cu creșterea concentrației de DCL.
- Date de Analiză Termică (TG, DGA, DSC) pentru caracterizarea tranzițiilor de fază și identificarea temperaturilor de tranziție.

- **Diseminarea rezultatelor**

I. 2 lucrări trimise în vederea publicării:

1. Solid state emission and ionic conductivity in columnar liquid crystals based on three-coordinate copper(I) complexes with S-donor benzoylthiourea derivatives

C. P. Ganea, I. Pasuk, D. Manaila Maximean, M. Secu, V. Cîrcu

Lucrare aflata in stadiu de recenzie la autori.

2. Composite materials based on liquid crystals and oxide nanopowders: Dielectric characteristics

I. Zgura, C.P. Ganea, L. Nedelcu, C. Bartha, M. Enculescu, N. Preda, L. Frunza, V. Cîrcu.

Lucrare aflata in stadiu avansat de pergitare.

II. Comunicari la conferinte:

1. Composite materials consisting of nematic liquid crystals and oxide nanopowders: Dielectric characteristics as function of the percent composition

L. Frunza, I. Zgura, C. P. Ganea, D. Manaila-Maximean, A. Schönhals

At The 13th International Conference on Physics of Advanced Materials, September 24-30, 2021, Sant Feliu de Guixols, Costa Brava, Spain, T10-I3-Lucrare Invitata

2. Confinement of molecules with cyan and/or ester functional groups: spectroscopic methods to put in evidence the surface species

L. Frunza, I. Zgura, C. P. Ganea, N. Apostol, A. Schönhals

TIM 20-21 Physics Conference, November 11-13, 2021, Timisoara, Romania, Lucrare Orala/Plenara

Titlu Fază: Procese fotocatalitice si hipertermie magnetica in microemulsii inverse

Termen: 11.11.2021

Obiective: 1. Studiul reducerii fotocatalitice pe suprafata nanoparticulelor de TiO_2 , in interiorul fazei dispersate a unor microemulsii inverse (a/u), a sarurilor de tetrazoliu MTT si MTS, utilizate ca indicatori in teste de viabilitate celulara in vitro

2. Studiul incalzirii unor ferofluide pe baza de $\text{Fe}_3\text{O}_4/\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ ce constituie faza dispersata a unor microemulsii inverse expuse la campuri magnetice alternative externe

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

Microemulsii inverse au fost obtinute folosind ca faza uleioasa continua n-heptan si ca faza dispersata apa bidistilata in raport 1,4:1. Surfactantul folosit pentru stabilizarea microemulsiei a fost TWEEN 80 (polisorbat 80) iar 1-butanol a fost folosit ca si co-surfactant. Raportul dintre surfactant si co-surfactant a fost de 3:1. Peste surfactant a fost adaugat co-surfactantul sub agitare continua. Faza uleioasa a fost adaugata peste amestecul format din surfactant si co-surfactant si solutia densa turbida formata a fost lasata un timp sub agitare magnetica. Faza apoasa a fost adaugata cu picatura, sub agitare magnetica, peste amestecul de surfactant, co-surfactant si faza uleioasa. Dupa cateva picaturi s-a observat formarea unui gel dens in toata masa amestecului, gel care s-a transformat intr-un fluid incolor si transparent sau translucid la final.

Microemulsie functionalizata cu TiO_2

Peste amestecul de surfactant, co-surfactant si faza uleioasa realizat conform descrierii de mai sus se adauga in picatura faza apoasa care consta intr-o suspensie de TiO_2 1 mg/mL in apa. Rezulta o microemulsie stabila de culoare alba care se lasa la agitat la temperatura camerei pentru o ora.

Microemulsie functionalizata cu nanoparticule magnetice

Peste amestecul de surfactant, co-surfactant si faza uleioasa (preparat conform descrierii de mai sus) se adauga in picatura, sub agitare mecanica, faza apoasa care consta intr-o suspensie de nanoparticule magnetice 20 mg/mL in apa. Rezulta o microemulsie stabila de culoare maro inchis care se lasa la agitare la temperatura camerei pentru o ora.

Dimensiunea si morfologia nanoparticulelor de TiO_2 sunt similare pentru cele patru nanomateriale studiate. În imaginea TEM reprezentativa din Fig. 1a se observă nanoparticule cvasi-sferice, având o dimensiune medie de ~11.7 nm. In analiza SAED din Fig. 1b, inelele cele mai intense corespund planelor cristalografice (101), (200), (103), faza tetragonală (anatase) a TiO_2 grup spațial $I4_1/amd$ (141), in concordanta cu rezultatele XRD.

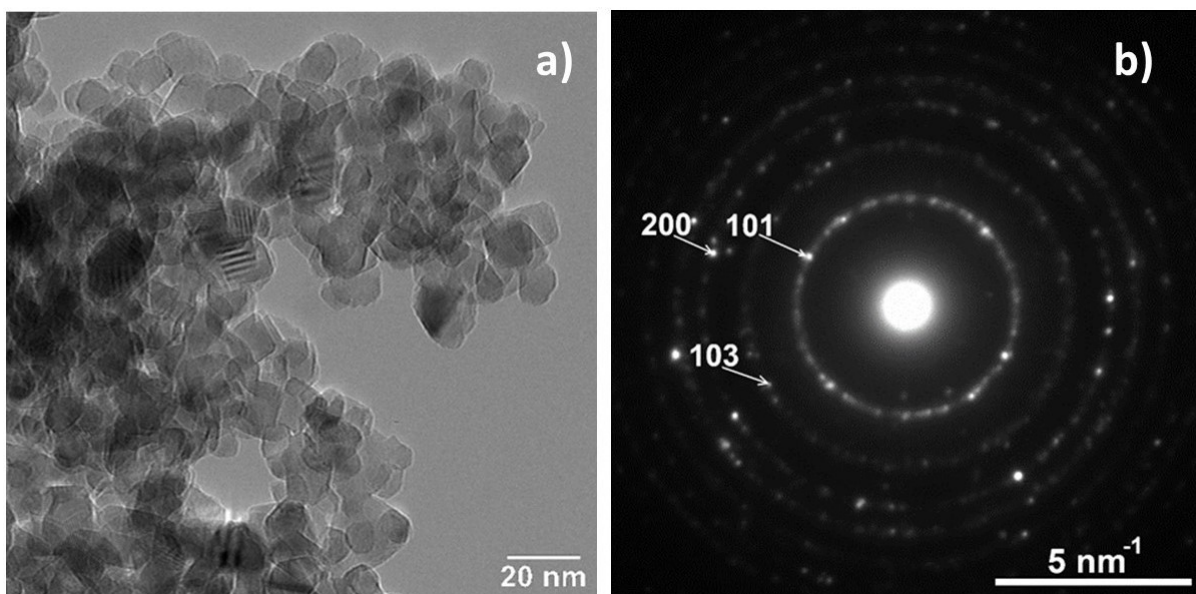


Fig. 1 a) Imagine TEM reprezentativa pentru nanoparticulele de TiO_2 sintetizate ; b) difracție de electroni (SAED) conducând la identificarea structurii de anatase a TiO_2

Nanomaterialele sintetizate au fost folosite pentru a crea sisteme coloidale hibride sub forma de microemulsii functionalizate cu proprietati magnetice si fotocatalitice (Fig. 2).

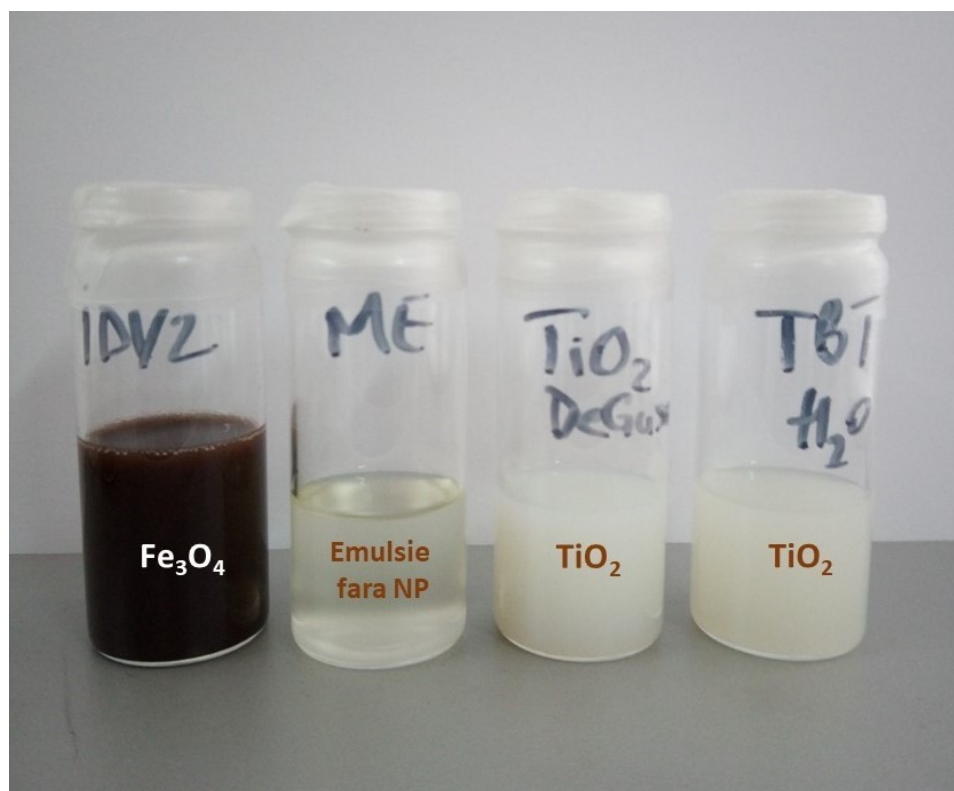


Fig. 2 Emulsii simple sau functionalizate cu nanoparticule magnetice si fotocatalitice

Testele de degradare a MB au evidențiat prezenta activității fotocatalitice în cazul emulsiilor funcționalizate cu nanoparticule de TiO_2 . Din cauza mediului de reacție complex, curbele de absorbanta au fost în general zgomotoase și nu au permis o analiză cantitativă a cineticii procesului fotocatalitic.

Concluzii și perspective:

- Au fost sintetizate nanoparticule de TiO_2 și nanoparticule magnetice ($\text{Fe}_3\text{O}_4/\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$);
- Proprietăților morfo-structurale ale nanoparticulelor de TiO_2 au fost caracterizate prin difracție de raze X și de electroni și microscopie TEM;
- Legăturile chimice aflate pe suprafața TiO_2 au fost analizate prin spectroscopie FTIR și au fost evidențiate diferențe cu potențial aplicativ privind caracterul hidrofob/hidrofil al acestora;
- Au fost obținute microemulsii inverse (a/u), în care faza dispersată este constituită din suspensii apoase de nanoparticule de TiO_2 sau $\text{Fe}_3\text{O}_4/\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$;
- A fost evidențiată existența activității fotocatalitice sub iradiere UV în cazul microemulsiilor funcționalizate cu TiO_2 ;
- În cazul microemulsiilor funcționalizate cu nanoparticule magnetice au fost determinate curbele și ratele de încălzire în prezenta câmpurilor magnetice alternative și a fost determinată dependența ratelor de încălzire de intensitatea câmpului aplicat.

În continuare, se urmărește aprofundarea studiilor făcute cu scopul îmbunătățirii controlului asupra proprietăților fizicochimice ale microemulsiilor hibride/compozite și se are în vedere potențialul pentru aplicații biomedicale ale acestora.

Lucrări publicate :

High-Performance Functionalized Magnetic Nanoparticles with Tailored Sizes and Shapes for Localized Hyperthermia Applications, Izabell Crăciunescu, Petru Palade, Nicușor Iacob, George Marian Ispas, Anda Elena Stanciu, Victor Kuncser, and Rodica Paula Turcu, *The Journal of Physical Chemistry C* 2021, 125, 20, 11132-11146

Lucrări aflate în pregătire :

- “Facile synthesis and biocompatibilization of iron oxide- TiO_2 nanocomposites with hyperthermic and photo-oxidation properties”; Traian Popescu, Christien Oktaviani Matei, Ioana Dorina Vlaicu*, Valentin-Adrian Maraloiu, Arpad Mihai Rostas, Alexandra Corina Iacoban, Lucian Diamandescu, Nicușor Iacob, Tudor Savopol, Monica Cristiana Ilas, Marcel Feder, Andreea-Roxana Lupu, Mihaela Georgeta Moisescu; manuscrisul va fi trimis pentru publicare la sfârșitul acestei luni.
- “Biocompatible multifunctional microemulsions with magnetic and photocatalytic properties” Traian Popescu, Monica Cristiana Ilas, Ioana Vlaicu, Nicușor Iacob, Alexandra Corina Iacoban

Titlu Fază: Proprietățile optice ale compozitelor poli-difenil-amina și fosforena

Termen: 11.11.2021

Obiective: evidențierea proprietăților optice al compozitului bazat pe poli difenil amina (PDPA) și fosforena (P).

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

În prezentul raport de cercetare atenția va fi focalizată pe sinteza electrochimică a compozitului poli difenilamine (PDPA)/P și evidențierea proprietăților sale optice. Electropolimerizarea DPA a fost efectuată prin voltametrie ciclică, soluția de sinteză constând din 10^{-2} M DPA, 10^{-3} M $\text{H}_3\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$, 1M HCl și BP (0.1, 0.2 și 0.5 mg/ml) în soluția semiapoasă de dimetilformamidă (DMF) și H_2O având raportul volumetric de 1:1. Amestecul de reacție a fost ultrasonat pentru 20 min. când are loc o exfoliere a BP în straturi de P. Domeniul de potențial utilizat a fost (+100; +960) mV vs. Ag/AgCl, viteza de scanare a potențialului fiind egală cu 50 mV/s. Celula electrochimică a fost conectată la un potențiostat/galvanostat Voltalab 80 de la Radiometer Analytical. În absența BP, pe suprafața electrodului de lucru este generată PDPA dopată cu heteropolianionii $\text{H}_3\text{PW}_{12}\text{O}_{40}$. Atât materialul compozit PDPA/P cât și interacția chimică a DPA cu BP a fost studiată prin fotoluminescența (PL) și spectroscopie IR. În cazul interacției chimice a DPA cu BP, concentrația de BP în masa amestecului DPA/P a fost variată de la 0% la 0.5% și 1%. În cazul compozitelor DPA/P, proprietățile vibraționale au fost evidențiate prin studii corelate de spectroscopie Raman și IR. Spectrele de PL au fost înregistrate cu un spectrofotometru Fluorolog 3.2.2.1 de

la Horiba Jobin Yvon. Spectrele IR si Raman au fost inregistrate cu spectrofotometrul FTIR, model Vertex 80, si respectiv spectrofotometrul FTRaman, model MultiRam, ambele achizitionate de la Bruker.

Spectrele de PL, marcate cu rosu in Fig. 1a-1c corespund spectrelor de PL al DPA si compozitelor sale cu BP, cand concentratia este egala cu 0.5 si 1%, inainte de expunerea la lumina UV. Figurile 1a, 1b si 1c sunt caracterizate printr-o banda cu maximul la 348, 347 si 346 nm avand intensitatea egala cu 1.51×10^6 , 9.57×10^5 si respectiv 6.68×10^4 cuante/sec. Expunerea la lumina UV, timp de 120 min. a DPA si compozitelor sale cu BP, cand concentratia este egala cu 0.5 si 1%, induce o scadere a intensitatii spectrelor de PL pana la cca. 2.99×10^4 , 2.34×10^4 si 1.53×10^4 cuante/sec. Intensitatea mai mica a spectrelor de PL in Fig. 1b si 1c in comparatie cu Fig.1a indica un proces de stingere al PL DPA indus de BP. Expunerea la lumina UV induce o crestere a intensitatii benzilor de PL situate in domeniul spectral 380-500 nm, aceste benzi indicand formarea dimerilor, trimerilor si oligomerilor.

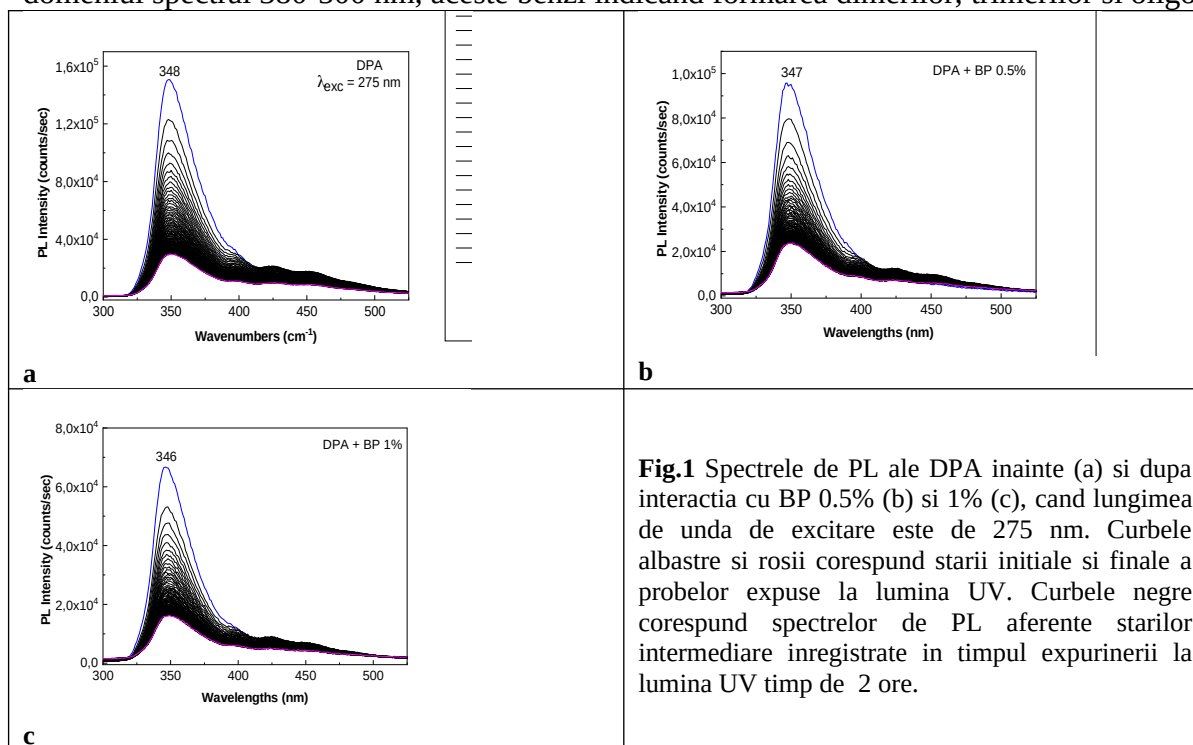


Fig.1 Spectrele de PL ale DPA inainte (a) si dupa interactia cu BP 0.5% (b) si 1% (c), cand lungimea de unda de excitare este de 275 nm. Curbele albastre si rosii corespund starii initiale si finale a probelor expuse la lumina UV. Curbele negre corespund spectrelor de PL aferente stariilor intermediare inregistrate in timpul expunerii la lumina UV timp de 2 ore.

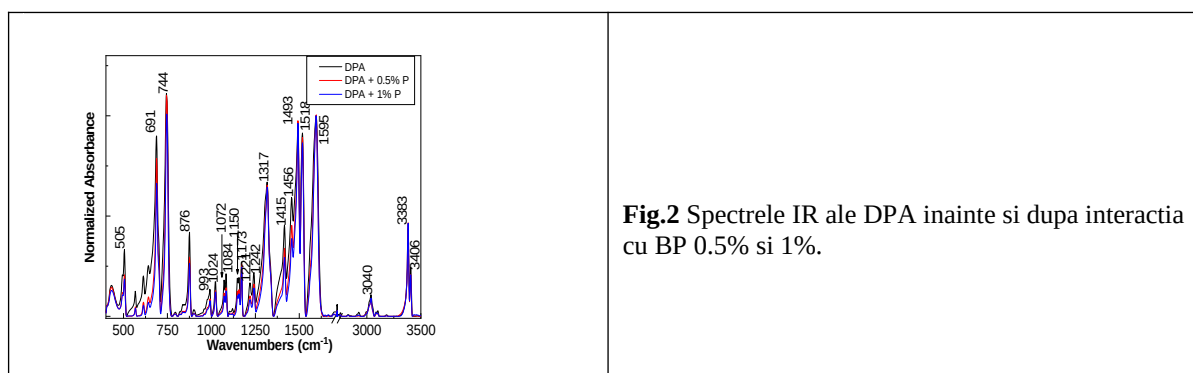


Fig.2 Spectrele IR ale DPA inainte si dupa interactia cu BP 0.5% si 1%.

Concluzii și perspective:

In aceasta etapa, rezultatele obtinute au vizat proprietatile optice ale compozitelor obtinute prin electropolimerizarea difenil aminei in prezenta fosforenei. Principalele rezultate au demonstrat ca: i) interactia chimica a BP cu DPA in conditii ambientale implica un proces de functionalizare covalenta care presupune formarea unor grupari de tip iminofosforena; ii) scaderea intensitatii spectrelor de PL ale DPA in prezenta BP evidentiaza rolul de agent de stingere al BP in cazul spectrelor de PL ale DPA; iii) straturile de P au rolul de agent de stingere a PL PDPA dopate cu heteropolianionii $H_3PW_{12}O_{40}$; iv) valoarea unghiului de anvelopare a straturilor de P cu PDPA, variaza de la 44.1° la 39.9° cand concentratia P in amestecul de reactie variaza de la 0 la 0.5 mg/ml; v) compozitele PDPA/P sunt caracterizate printr-o pondere mai mare a inelelor chinoide

in comparatie cu inelele benzenice, care sunt preponderente in PDPA ; vi) electro-oxidarea DPA interactionate chimic cu P conduce la cresterea lanturilor macromoleculare, proces care este acompaniat de efecte de impiedicare sterica induse ciclurilor chinoidale ale PDPA si legaturilor W=O si P-O-W apartinand heteropolianionilor care compenseaza sarcinile pozitive existente in lantul macromolecular al PDPA. Un compus secundar al acestei reactii corespunde fosforoxidului, care rezulta prin oxidarea fosforenei, cand sunt generate grupari de tip P=O evidentiata in produsul de reactie prin banda IR de la 1633 cm^{-1} . Gradul de indeplinire a obiectivelor propuse pentru aceasta etapa au fost atinse in proportie de 100%. Rezultatele prezentate in acest raport de cercetare fac obiectul manuscrisului intitulat “Electrochemical oxidation of diphenylamine in the presence of phosphorene and optical properties of the phosphorene-based composite material”, care este in pregatire pentru a fi trimis spre publicare la Polymers.

Titlu Fază: Creșterea durabilității celulelor solare perovskite hibride prin încapsulare

Termen: 09.12.2021

Obiective: În aceste celule solare perovskite hibride, mecanismele principale de degradare sunt cauzate în special de umiditate, temperatura și oxigen, ducând la degradarea rapidă a stratului fotoactiv și a electrodului metalic superior.

Scopul studiului este investigarea unor proceduri de încapsulare robuste și cât mai puțin costisitoare pentru a stabili și a prelungi durata de funcționare pentru celulele solare perovskite realizate în laborator.

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

În acest studiu, s-a pornit de la încapsularea uzuală folosind o placuță de sticlă atașată peste dispozitiv și un adeziv pe baza de rășină epoxidică, ce reticulează în prezența luminii, și mai eficient în prezența radiației UV. Această rășină sau adeziv, este un produs comercializat de Ossila Ltd, UK, denumit **E 132**. Pentru substraturi mici de până la 2 cm^2 , este suficientă o singură picătură de rășină depusă cu pipeta direct peste probă, peste care se plasează plăcuța de sticlă. Rășina de încapsulare, nefiind vâscoasă se împrăștie sub greutatea sticlei în decurs de câteva secunde, iar apoi tot dispozitivul se plasează sub o lampă cu radiație UV pentru câteva minute.

Structura dispozitivelor de încapsulat, celule solare pe bază de perovskit hibrid, este cea standard mezoscopică formată dintr-o succesiune de straturi cu funcții diferite, astfel: Substrat sticlă/ FTO/ TiO_2 compact/ TiO_2 mezoporos/ $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{2.6}\text{Cl}_{0.4}$ / Spiro-OMeTAD/ Aur.

Compoziția perovskitului folosit este optimizată [4] și a fost menținută aceeași pentru toate probele din cadrul acestui studiu. De asemenea, celelalte straturi au fost optimizate anterior conform referinței citate. Dimensiunea substraturilor cât și aria activă a dispozitivelor a variat în funcție de posibilitatea de contactare a electrozilor.

Trei strategii diferite de încapsulare au fost folosite: 1) încapsularea cu placuță de sticlă cu adeziv pe toată suprafața probei, 2) încapsularea cu placuță de sticlă și adeziv în jurul unei bariere protectoare și 3) încapsularea folosind o folie polimerică, ea însăși adezivă, cu adeziv la margine, dar fără chenar. În toate cazurile, pentru a obține o etanșare optimă s-a folosit rășina epoxidică, recomandată pentru dispozitivele fotovoltaice organice cu specificația ca nu deteriorează componentele dispozitivelor fotovoltaice organice. Cele 3 moduri de încapsulare sunt prezentate schematic în figura 1.

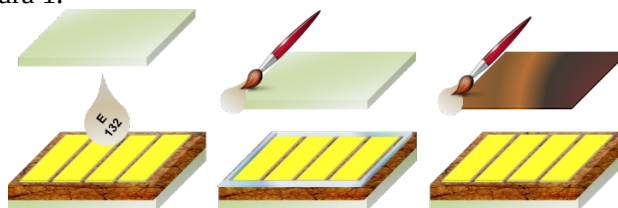


Figura 1. Prezentare schematică a modurilor de încapsulare a celulelor solare

1). Primele încercări au fost efectuate pe o probă de $15 \times 25\text{ mm}$ ce conține 4 dispozitive cu o arie activă de 0.09 cm^2 . O singură picătură de adeziv a fost suficientă pentru toată proba, peste care s-a aplicat o plăcuță de sticlă ce acoperă toți cei 4 electrozi. Pentru contactare, înainte de încapsulare s-au lipit cu aliaj de indiu-galiu fire de cupru subțiri direct pe fiecare electrod. Pentru reticularea rășinii s-a aplicat lumina de la un bec cu incandescență timp de 3 minute. Rezultatele sunt prezentate în figura 2.



Figura 2. Proba cu 4 celule solare, încapsulate cu rășina epoxidică și placuță de sticlă peste electrozii de aur

Tabel 1. Parametri fotovoltaici ai probei CB5 înainte de încapsulare, valori medii între măsurătorile forward și reverse

Proba CB5 Contact	Voc (V)	Jsc (mA/cm ²)	FF (%)	PCE (%)
C1	scurtcircuitat			
C2	0.880	6.7	58	3.38
C3	0.830	8.4	44	3.05
C4	0.871	3.5	72	2.15

O altă metodă de încapsulare a fost folosirea unei folii polimerice adezive, comercială, care ecranează pe un spectru larg, de la radiație IR (70%) până la UV (99%), rezistență la zgârieturi și umezeală. Această folie se găsește sub denumirea de folie **LLumar** și se folosește, în mod uzual, pentru acoperirea ferestrelor sau a geamurilor în clădiri rezidențiale, comerciale sau în industria de automobile. Mai departe s-au ales 3 probe fabricate în același lot, două încapsulate cu folie, B38 și B41, și una neîncapsulată, B40 cu geometrie identică, pentru a determina influența încapsulării asupra eficienței celulelor solare (figura 53). Aceste probe s-au păstrat în mediu ambiental, la întuneric și au fost măsurate în fiecare zi până când una dintre ele nu a mai putut fi măsurată, s-a deteriorat. De menționat este faptul că la încapsulare, la proba B41, folia a prins bule de aer în interior. Când s-a încercat scoaterea acestor bule prin dezlipirea foliei și reatașarea ei, folia s-a desprins cu tot cu electrodul superior de aur, dar a fost relipită în aceeași poziție.

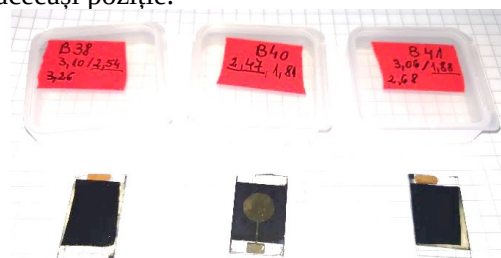


Figura 3. Probele B38 și B41 încapsulate cu folie LLumar, și proba B40 neîncapsulată.

În urma măsurătorilor periodice se observă o diferență clară între dispozitivele încapsulate și celula neîncapsulată. Deși proba B40 neîncapsulată pornește cu cea mai bună eficiență, are o comportare haotică și în final se deteriorează complet. Vizual, se observă și o decolorare a perovskitului care din brun-roșcat devine gri și transparent. Probele încapsulate prezintă și ele o scădere a eficienței la jumătate dar rămân funcționale.

Tabel 2. Evoluția eficienței celulelor încapsulate, comparativ cu celula neîncapsulată

Proba	PCE (%)											
	medie a valorilor de forward și reverse măsurate zilnic											
	0	3	4	5	6	7	10	11	13	14	17	18
B38	3.10	3.26	3.29	-	3.02	2.80	2.70	2.08	2.50	2.01	1.65	1.73
B40 (n)	2.47	1.81	1.85	1.63	1.47	2.30	2.53	2.16	2.08	1.28	0.67	0
B41	3.07	2.69	2.01	2.06	1.78	1.86	1.88	1.76	1.79	1.52	1.61	1.52

Concluzii și perspective:

1. Adezivul E 132 pentru încapsulare nu este compatibil cu perovskitul studiat, prin urmare este necesară folosirea unei bariere protectoare din bandă dublu adezivă. Cu toate acestea după reticulare, adezivul nu mai acționează asupra perovskitului.

2. Încapsularea cu placuță de sticlă și rășină izolatoare împrejurul sticlei, cu bariera din bandă dublu adezivă, nu implică un contact intim cu proba, formându-se astfel o patură de atmosferă inertă dacă încapsularea se face în glove-box sau de aer cum este cazul de față, unde încapsularea s-a făcut în aer. Cu toate acestea, dispozitivele încapsulate în cadrul acestui studiu nu s-au degradat din cauza acestei păături de aer.
3. Folia LLumar folosită pentru încapsulare prezintă aderență bună și protejează celulele solare. În plus, fiind flexibilă, poate fi folosită pentru celule solare pe suport flexibil.
4. Este extrem de importantă contactarea electrozilor în afara zonei încapsulate, dar cel mai problematic este electrodul superior de aur. Acesta se depune prin pulverizare catodică asistată de magnetron și este foarte subțire, deci sensibil la deteriorare. Prin urmare, geometria electrodului superior și a ariei active a dispozitivului trebuie bine stabilită înainte de încapsulare.
5. Proba B41, chiar și după dezlipirea accidentală a electrodului superior, a rămas funcțională, cu comportare normală după încapsulare.

Titlu Fază: Metode termice și magnetice în optimizarea procesării de aliaje feritice nanostructurate consolidate prin dispersie de oxizi (ODS)

Termen: 11.11.2021

Obiective: Obținerea de aliaje Fe14Cr ODS nanostructurate prin aliere mecanică.

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

Introducerea intenționată a azotului, carbonului și oxigenului în diverse cantități pe durata procesului de macinare poate fi o metodă viabilă de investigare și înțelegere a influenței acestor impurități asupra calității pulberilor și a oțelului feritic consolidat din aceste pulberi. În acest scop, patru seturi de oțel feritic Fe-Cr au fost obținute prin macinarea mecanică a pulberilor inițiale de compoziție Fe-14Cr-3W-0.4Ti-0.25Y₂O₃ în moara planetară cu bile în următoarele condiții: (1) cu etanol (0.25wt. %, 2.5wt. %, 4wt. % și 20wt. %) în atmosfera de Ar, (2) în atmosfera de azot cu întreruperea procesului de macinare, (3) în atmosfera de Ar cu întreruperea procesului de macinare și (4) în atmosfera de Ar fără întreruperea procesului de macinare. Pulberile au fost consolidate prin SPS. A fost investigată influența incorporării carbonului, a azotului și a oxigenului asupra proprietăților (termice, microstructurale, magnetice, densității și a durității Vickers) pulberilor macinate și oțelurilor consolidate.

Rezultatele XRD pentru cele patru seturi de probe arătate în Fig. 1 (macinate cu etanol), Fig. 2 (macinate în N₂), Fig. 3 (macinate în Ar cu întreruperea procesului de macinare) și Fig. 4 (macinate în Ar fără întreruperea procesului de macinare) indică că FWHM (dimensiunea de cristalit) a fazei feritice bcc- α în pulberile macinate descrește (crește) cu creșterea cantității de etanol și a timpului de macinare. Rezultatele de analiză termică (DTA) și spectrometrie de masă (MS) pentru cele patru seturi de probe sunt arătate în Fig. 5 (macinate cu etanol), Fig. 6 (macinate în N₂), Fig. 7 (macinate în Ar cu întreruperea procesului de macinare) și Fig. 8 (macinate în Ar fără întreruperea procesului de macinare). Pulberea macinată cu cea mai mare cantitate de etanol, 20wt. %, conține carburi (M₃C) și oxizi ((Fe,Cr)₂O₃) (Fig. 1a). Analiza termică arată că odată cu creșterea cantității de etanol (carbon și oxigen): (i) crește temperatura Curie, T_c , (ii) temperatura de tranziție de fază $\alpha \rightarrow \gamma$, $T_{\alpha \rightarrow \gamma}$, descrește și (iii) cresc pierderile de masă cu degajare de CO (m/Z=28) și CO₂ (m/Z=44). Pulberile macinate în atmosfera de N₂ conțin nitruuri, CrN (Fig. 2, stanga), însă nu indică prezența oxizilor. La fel, pulberile macinate timp îndelungat, 113h și 170h, în Ar cu întreruperea procesului de macinare conțin CrN (Fig. 3). XRD a pulberilor macinate în Ar fără întreruperea procesului de macinare (Fig. 4) indică lipsa fazelor secundare însă o înregistrare foarte îndelungată efectuată pe pulberea macinată 170h arată urme de Cr₂N și fcc - γ (insetul Figurii 4). Rezultatele XRD (Figurile 2- 4) și analiza termică (Figurile 6-8) arată că odată cu creșterea timpului de macinare în azot și Ar și/sau cu creșterea cantității de azot (și oxigen) incorporat: (i) temperatura Curie, T_c , crește, (ii) temperatura de tranziție de fază $\alpha \rightarrow \gamma$, $T_{\alpha \rightarrow \gamma}$, descrește și (iii) cresc pierderile de masă cu degajare de N₂.

Rezultatele obținute au fost analizate în termenii de: (i) dizolvarea azotului, oxigenului și carbonului (eliberat după descompunerea etanolului) în matricea aliajului feritic, (ii) precipitarea carburilor, nitruurilor și oxizilor în timpul macinării mecanice și al tratamentului termic, (iii) promovarea proceselor activate termic (reacții de reducere carbotermală, reacții de descomunere a nitruurilor) care pot avea loc inclusiv în punctele de

contact
între
particule/la
suprafata
particulelor

Fig. 1 Rezultatele masuratorilor XRD pentru: (a) pulberile de otel feritic obtinute prin macinare mecanica cu ethanol (P0.25, P2.5, P4 and P20), pulberile (b) P4 si (c) P20 tratate termic la diverse temperaturi si (d) otelurile A0.25, A2.5, A4 si A20 consolidate prin SPS si tratate termic la 1050 °C. SPS si care pot influenta procesul de densificare.

Fig. 2 Rezultatele masuratorilor XRD pentru (stanga) pulberile de otel feritic macinate in azot, (dreapta) pulberea macinata in azot timp de 38h si tratata termic la diverse temperaturi.

Fig. 3 Masuratorile XRD pentru pulberile macinate in Ar cu intreruperea procesului de macinare.

Fig. 4 Rezultatele masuratorilor XRD pentru pulberile macinate in Ar fara intreruperea procesului de macinare.

Concluzii și perspective:

In scopul de a intelege influenta impurificarii cu azot, oxygen si carbon (preluate din aer sau din mediul de macinare in procesul de aliere mecanica in cantitati sub limita de detectie a tehnicilor conventionale de masurare) asupra calitatii pulberilor si a otelului feritic consolidat am introdus intentionat aceste impuritati in diverse cantitati in etapa de macinare mecanica. Am investigat influenta incorporarii azotului, carbonului si oxygenului asupra proprietatilor (termice, microstructurale, magnetice, densitatii si a duritatii Vickers) otelurilor feritice folosind patru seturi de pulberi obtinute prin macinarea mecanica in urmatoarele conditii: (1) cu diverse cantitati de ethanol, (2) in atmosfera de azot cu intreruperea procesului de macinare, (3) in atmosfera de Ar cu intreruperea procesului de macinare si (4) in atmosfera de Ar fara intreruperea procesului de macinare. Folosind analiza termica si magnetica, metodele sensibile la prezenta impuritatilor si a defectelor microstructurale, am aratat: (i) ca la macinarea mecanica uscata in atmosfera de Ar pulberea poate fi contaminata cu azot si oxygen preluat din aer si/sau cu carbon preluat din mediul de macinare cu o tendinta de formare de precipitate de nitruri (N_2C , NC), carburi (M_3C , $M_{23}C_6$) si oxizi ($(Fe, Cr)_2O_3$), (ii) cum acesti contaminanti pot influenta microstructura, dimensiunea de graunte, densitatea (procesul de densificare) si proprietatile mecanice (duritatea Vickers) ale otelurilor feritice

Pe baza rezultatelor obtinute propunem urmatoarele conditii optime pentru a reduce contaminari in etapa de macinare, consolidare si/sau eliminarea lor in etapa de tratament termic a pulberilor macinate sau a otelurilor consolidate:

1. Densitatile si duritatile cele mai mari, cu cele mai mici contaminari, se pot obtine pe oteluri feritice (consolidate si/sau urmate de un tratament termic) preparate din pulberi macinate timp de 70h -100 h in atmosfera de Ar fara intreruperea procesului de macinare.

2. Densitat si duritati mari se mai pot obtine pe oteluri feritice (consolidate si/sau urmate de un tratament termic) preparate din pulberile macinate intre 40h - 50h cu $\sim 4\text{wt. \%}$ de ethanol; in acest caz insa contaminariile cu carbon si oxigen sunt mai mari deact in cazul (1).

3. Propunem urmatoarele conditii optime de procesare de oteluri feritice ODS in particular pentru reducerea contaminarilor/fazelor secundare sub cantitatile cu impact important asupra proprietatilor mecanice (ductilitatii):

-macinare in atmosfera de Ar timp de 60h - 100h (fara intrerupere) si tratamente termice peste 1050°C - 1200°C pentru activarea proceselor termice cu eliminarea azotului si oxigenului.

-macinare in atmosfera de N_2 pana la 80h (in cazul in care se doreste o reducere la minim a contaminarii cu carbon si oxigen) urmata de tratamente termice intre 1000°C - 1200°C pentru activarea proceselor termice cu eliminarea azotului.

- macinare cu aproximativ $4\text{wt. \%}$ de ethanol (in cazul in care se doreste o reducere la minim a contaminarii cu azot) urmata de tratamente termice peste 1100°C - 1250°C pentru activarea proceselor termice cu eliminarea carbonului.

Propuneri pentru continuarea proiectului:

Rezultatele obtinute in cadrul acestui proiect vor fi folosite pentru producerea de oteluri feritice nanostructurate ODS cu proprietati mecanice imbunatatite, in particular pentru aplicatii in materiale structurale ale reactoarelor de fuziune.

Publicatii:

O parte din rezultatele acestui raport da faza, care nu au fost raportate pana in prezent, se regasesc in publicatia: V. Mihalache, G. Aldica, I. Pasuk and I. Mercioniu, Thermal analysis and microstructure of oxide dispersion strengthened ferritic steels produced by ball milling with different amounts of process control agent, J. Therm. Anal. Calorim., 2019, 138, 2515–2528.

O alta parte a rezultatelor se contine in manuscrisul trimis spre publicare:

Thermal analysis of Fe–14Cr ferritic steel powders ball-milled under a nitrogen atmosphere: impurity phases evolution.

Titlu Fază: **Calculul functiilor de unda quasi-particula relevante in microscopia STM pe nano-structuri.**

Termen: 11.11.2021

Obiective: Dezvoltarea formalismelor existente in literatura prin considerarea tunelarii posibile pe stari excitate. Evidentierea rolului corelatiilor electronice in distributia spatiala a functiilor de unda Quasi-Particula.

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

Studiile teoretice prezentate in cadrul acestei faze se refera atat la proprietati spectrale intrinseci ale unor nano-structuri de tip molecule artificiale, cat mai ales la prezicerea unor proprietati masurabile in transport si in masuratorile de tip microscopie electronica de baleaj (STM).

In acest rezumat al fazei vom prezenta in principal rezultatele obtinute pe structura de Fulvena, alte structuri studiate fiind cele hexagonale (benzenul) , octogonale, si diverse retele bipartite.

Anterior am dezvoltat un algoritm care poate prezice zerouri ale conductantei anumitor sisteme fizice rezultate direct din proprietati geometrice (de conectivitate). Mai mult, este vorba de zerouri absolute, « robuste » (si partea imaginara si cea reala a conductantei se anuleaza la aceeasi energie), care sunt independente de taria cuplajului la fire, fiind asadar fundamental diferite de obisnuita valoare scazuta a conductantei intre rezonante.

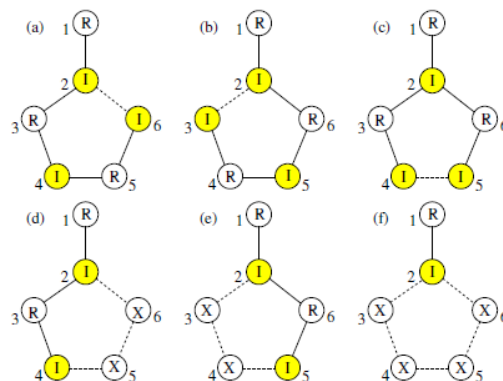
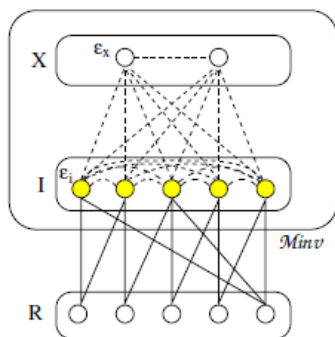


Fig.1 (stanga) schema generala de construire a unor sisteme complexe cu proprietati predictibile de anulare a conductantei – a se vedea descrierea in text. (dreapta) exemplificarea schemei generale pentru gasirea zerourilor conductantei in Fulvena.

Reteta pe care o propunem este urmatoarea : Se porneste cu un sistem care contine un sub-set particular de site-uri cu urmatoarea proprietate : Conductanta se anuleaza intre oricare perechi dintre aceste site-uri, inclusiv in cazul cand ambele fire sunt legate la acelasi site. Aceste puncte sunt notate cu « I » (numite de noi puncte de interferenta) si au deci proprietatea pe care o putem scrie generic $G_{II}=0$. Restul site-urilor din acest sistem initial sunt notate cu « R » (puncte rigide). Totalitatea punctelor I+R formeaza asadar sistemul initial. Ulterior, se poate demonstra ca daca se conecteaza puncte externe, « X » la punctele I, in orice mod, sistemul final va pastra proprietatile de anulare a conductantei intre punctele initiale I si in plus, conductanta este nula si intre orice punct din multimea I si orice punct din multimea X, $G_{IX}=0$.

Impartirea unui sistem in seturi de puncte I, R si X nu este unica. Partea dreapta a Fig.1 arata modurile posibile in care punctele I, R si X pot fi alese in cazul moleculei de Fulvena, pentru a prezice toate zerourile conductantei (detalii pot fi gasite in [4]).

Este important de mentionat ca proprietatea ca un sistem sa contina un sub-sistem de puncte (« I ») cu proprietatea de anulare a conductantei intre oricare doua dintre ele nu este universală, dinpotriva este o exceptie, intalnita de exemplu in sistemele bipartite. Fulvena nu este un sistem bipartit, dar putem gasi subsisteme bipartite de tip lantisor (sistem 1D). Se stie ca un sistem bipartit poate fi separat in doua sub-sisteme « A » si « B » cu proprietatea ca hoppingul se permite doar intre A si B, nu si intre AA sau BB. Daca un electron incident vine cu energia « zero » (corespunzatoare mijlocului spectrului) se poate demonstra anularea conductantei intre oricare perechi de puncte AA sau BB, care pot fi alese ca puncte de tip « I » in algoritmul general descris anterior.

Concluzii și perspective:

Importanta practica a functiilor de unda quasi particula (QPWF) este ca raspund la intrebarea «cum arata o molecula privita cu un STM ? » . In cazul unor valori importante a raportului interactie/level spacing aceste imagini pot diferi semnificativ de functiile de unda uni-particula.

1. Studiile de transport electronic pe nano-structuri au fost publicate in articolul: M. Nita, M. Tolea, D.C. Marinescu, "Conductance zeros in complex molecules and lattices from the interference set method", Phys. Rev. B 103, 125307 (2021).

2. Studiile privind calculul functiilor de unda quasi particula, relevante pentru microscopia STM, au fost finalizate si se afla in stadiul de articol in pregatire (M. Tolea, M. Nita et. al, titlu posibil : « How do molecules look like if looked at with a STM ? »).

Titlu Fază: Studii biologice si de stabilitate ale nanoparticulelor de oxid de fier functionalizate cu aplicatii in tratamentul neoplasmelor

Termen: 09.12.2021

Obiective: Obținerea și caracterizarea fizico-chimică și biologică a nanoparticulele de oxid de fier funcționalizate cu aplicații în tratamentul neoplasmelor.

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

Scopul acestui studiu a fost acela de a studia stabilitatea și proprietățile biologice a nanoparticulelor de maghemita înglobate într-o matrice de siliciu (OFSi-NP) obținute anterior cu aplicații în tratamentul neoplasmelor. Stabilitatea OFSi-NP a fost evaluată prin studii DLS (Dynamic Light Scattering) iar biocompatibilitatea acestora fost analizată utilizând teste *in vitro*, care au permis cuantificarea viabilității celulelor osteoblaste și HepG2. Nanoparticulele de oxid de fier funcționalizate au fost obținute printr-o metoda descrisă anterior în literatura de specialitate. Dimensiunea medie a particulelor a fost determinată cu ajutorul unui analizor de nanoparticule de tip SZ-100 (Horiba) utilizând împrăștierea dinamică a luminii (DLS). Pentru a calcula dimensiunea particulelor s-a utilizat ecuația Stokes-Einstein.

Testele de viabilitate celulară sau efectuate pe 2 linii celulare : celule osteoblaste hFOB 1.19 și celulele HepG2 (achiziționate de la American Type Culture Collection (ATCC CCL-121™, Rockville, MD, SUA). Astfel, celulele au fost menținute într-un mediu DMEM (Dulbecco's modified Eagle's medium, Sigma-Aldrich) în care s-a adăugat 10% ser fetal bovin (Sigma-Aldrich) și 1% soluție antimicotică antibiotică (ce conține 10.000 unități penicilină, 10 mg streptomycină și 25 μg amfotericină B per mL, Sigma-Aldrich) la 37 °C într-o atmosferă umidificată de 5% CO₂. Apoi, celulele cultivate au fost adăugate pe discuri nanocompozite de OFSi-NP cu o densitate de însămânțare de 5x10⁴ celule/cm² în plăci cu 24 de godeuri. Celulele cultivate în plăci cu 24 de godeuri la aceeași densitate de însămânțare au fost utilizate ca martor.

Viabilitatea celulelor osteoblaste hFOB 1.19 a fost determinată cantitativ cu ajutorul testului MTT (Figura 1). Rezultatele testului MTT indică faptul că, viabilitatea celulară a celulelor osteoblaste hFOB 1.19 în prezența diferitelor concentrații de OFSi-NP (concentrații cuprinse între 25 și 100 μg/mL) pentru un interval de expunere de 24 de ore de la incubare arată că viabilitatea hFOB 1.19 în prezența OFSi-NP-uri a fost similară cu cea a probei martor, așa cum se poate observa în Figura 2 sus. Mai mult, rezultatele au arătat că după expunerea la concentrații de OFSi-NP ce au pornit de la 25 până la 100 μg/mL, timp de 48 de ore, viabilitatea celulelor osteoblaste hFOB 1.19 nu este influențată de prezența OFSi-NPs (Figura 2 jos).

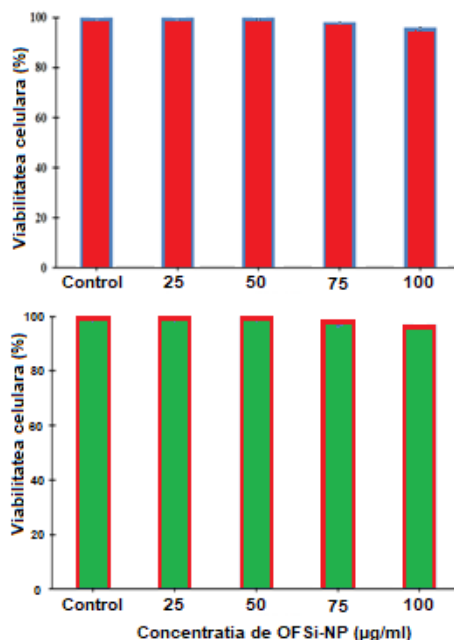


Figura 1: Viabilitatea celulara a celulelor osteoblaste expuse la diferite concentratii de OFSi-NP (25, 50, 75 and 100 µg/mL), obtinute prin testul MTT, incubate timp de 24h (sus) si 48h (jos).

Concluzii și perspective:

Rezultatele studiilor DLS au aratat ca nanoparticulele OFSi-NP au o distributie unimodala cu o dimensiune medie a particulelor de 16 nm. Studiile noastre au aratat ca viabilitatea celulară nu a fost influențată de prezența OFSi-NP, păstrându-se o bună aderență morfologică fapt ce demonstrează buna biocompatibilitate a nanoparticulelor analizate. Mai mult, prezenta nanoparticulelor de OFSi-NP nu modifica morfologia nucleelor și nici citoscheletul celulelor transfectate. Dar, pentru o mai bună înțelegere a comportamentului acestor nanoparticule asupra sănătății, sunt necesare studii mai complexe privind toxicitatea indusa după administrarea particulelor nanometrice functionalizate la soareci.

Articol publicat

Iconaru, S.L.; Ciobanu, C.S.; Predoi, D.; Motelica-Heino, M.; Negrila, C.C.; Badea, M.L.; Predoi, M.V.; Chifiriuc, C.M.; Popa, M. Nitrogen and Bromide Co-Doped Hydroxyapatite Thin Films with Antimicrobial Properties. Coatings 2021, 11, x. <https://doi.org/10.3390/xxxxx>.

Titlu Fază: Studiul proprietatilor piroelectrice in structuri feroelectrice epitaxiale fara plumb

Termen: 09.12.2021

Obiective: Proiectul vizeaza studiul proprietatilor piroelectrice in structuri feroelectrice fara plumb, care contin filme epitaxiale realizate prin ablatie laser pe diferite substraturi, cu scopul utilizarii acestora in senzori piroelectrici, in locul celor care contin plumb . Raspunsul piroelectric este legat de proprietatile intrinseci ale materialului piroelectric folosit, dar si de proprietatile termice ale substratului. Se va urmări maximizarea raspunsului piroelectric prin realizarea unor filme subtiri de calitate buna, prin utilizarea unor contacte metalice adecvate, dar si prin valorificarea anumitor contributii extrinseci, ca de exemplu a celor piezoelectrice, la valoarea totala a semnalului.

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

Ne-am propus prepararea si investigarea proprietatilor structurale, electrice si piroelectrice pentru structuri ce contin filme subtiri din materiale prietenoase cu mediul si cu sanatatea umana (fara plumb), realizate prin ablatie laser (PLD) sau magnetron sputtering (tehnica ce se preteaza la suprafete cu arii mai mari) cu scopul utilizarii acestora in senzori piroelectrici, in locul celor care contin plumb._

In cazul PLD, optimizarea parametrilor de depunere (energia laser, distanta tinta-substrat, temperatura substratului, presiunea de lucru, compozitia de gaz din interiorul camerei de depunere) are ca finalitate obtinerea filmelor subtiri de ferita de bismut (BFO), pe substraturi monocristaline, ale caror proprietati structurale, electrice si piroelectrice vor putea fi corelate si care vor putea fi utilizate ulterior in dispozitive de sensoristica IR. In cazul RF Sputtering se pot obtine, in functie de substratul ales, filme bine orientate dupa axa c.

Pentru a le obtine, va fi ales un tip de substrat cu parametrii de retea asemanatori cu cei ai filmului ce urmeaza a fi crescut (ex. titanatul de strontiu, STO). O atentie sporita va fi acordata calitatii interfetelor (substrat-film subtire-electrozi).

Pentru filmele realizate prin PLD au fost achizitionate substraturi monocristaline de STO, tinte de BiFeO₃ (BFO) si SrRuO₃ (rutenat de strontiu, SRO). Tinta de SRO este folosita pentru obtinerea unui strat buffer intre substratul de STO si stratul feroelectric, care are atat rolul de electrod inferior in structura de tip capacitor, cat si rol favorizant cresterii epitaxiale. Substraturile monocristaline de STO, sunt supuse unor tratamente de corodare chimica si termica, pentru a controla terminatia substratului ceea ce conduce la obtinerea filmelor subtiri epitaxiale. Curatarea prealabila a substraturilor s-a realizat

conform retetei: curatare in baia de ultrasunete in apa distilata timp de 5 min, corodarea in solutie buffer de HF-NH₄ timp de 20 secunde urmata de un tratament termic in aer la 1000 °C, timp de 4 ore. Pentru obtinerea stratului cu proprietati conductoare de SRO, substratul a fost incalzit la o temperatura de 700°C, in atmosfera de oxigen (0.133 mbar), tinta a fost ablatata cu o fluanta laser de 2 J/cm² si frecventa pulsurilor a fost de 5 Hz.

Caracterul feroelectric al straturilor de BFO realizate a fost testat la nivel local cu ajutorul microscopului de forta atomica folosind modulul piezo (PFM), Fig. 1. Pentru a maximiza raportul semnal/zgomot raspunsul piezoelectric a fost masurat la frecventa de rezonanta a sistemului format de varf si suprafata probei. Rezultatele obtinute pun in evidenta caracterul feroelectric al stratului subtire de BFO. Se poate afirma ca domeniile feroelectrice din stratul subtire de BFO au o orientare preferentiala si anume dinspre substrat catre suprafata stratului, asa cum se observa din contrastul imaginii fazei raspunsului piezoelectric (Fig.1b) prezent in afara celor doua suprafete rectangulare polate cu tensiuni de -10 V si +10 V. Peretii ce separa cele doua domenii feroelectrice antiparalele obtinute in urma polarizarii sunt clar vizibili in Fig.1c fiind reprezentati prin liniiile negre unde amplitudinea raspunsului piezoelectric are valori minime. In Fig.1d este prezentata harta de polare prin intermediul careia a fost aplicata tensiune pozitiva la exterior si tensiune negative la interior.

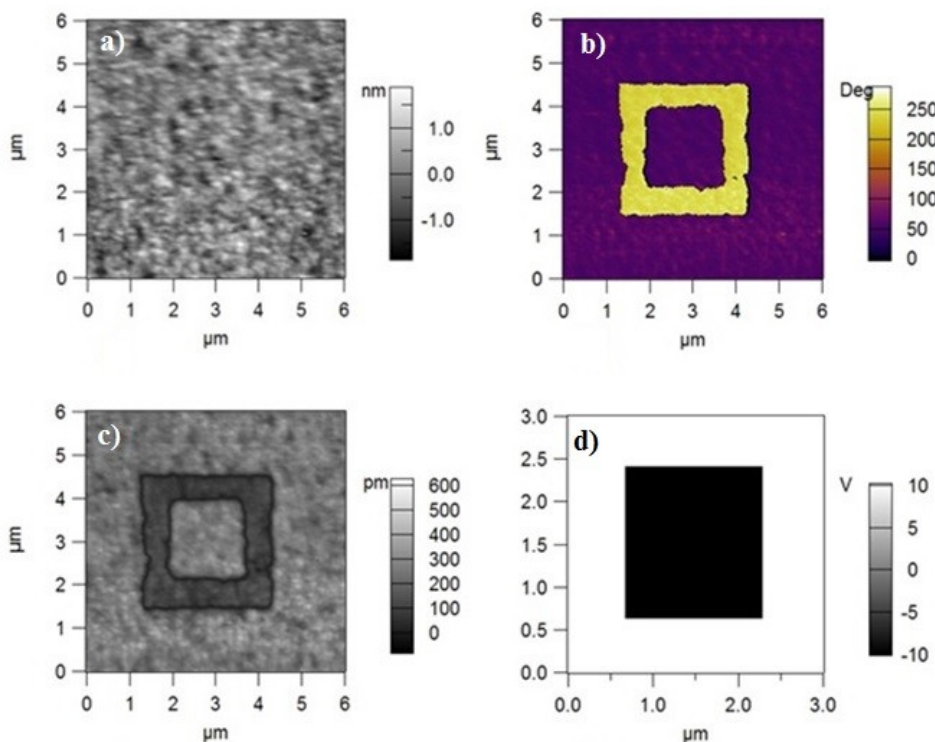


Fig. 1: Imagini AFM si PFM ale stratului subtire de BFO: a) topografia ; b) faza; c) amplitudinea raspunsului piezoelectric; d) harta de polare.

Fig.2 reprezinta semnalul piroelectric in functie de frecventa inregistrat pe probele de AlN cu substraturi diferite. S-a obtinut o valoare mai mare a semnalului piroelectric in cazul stucturii cu substrat de safir, comparativ cu a celui inregistrat pe proba cu substrat de alumina, pe tot domeniul de frecventa ales (100 mHz- 100 Hz).

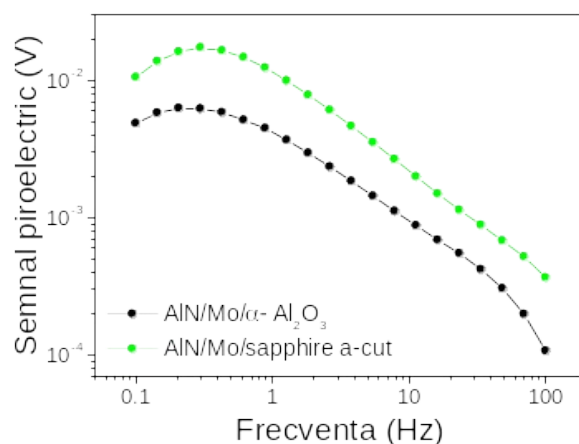


Fig. 2: Dependenta de frecventa a semnalului piroelectric generat in filme subtile de AlN pe substraturi diferite, de Al_2O_3 si safir.

Concluzii și perspective:

Rezultatele obținute fac obiectul unei lucrări științifice ce urmează să fie trimisă spre publicare.

În studiile viitoare se vor căuta metode care să contribuie la îmbunătățirea proprietăților piroelectrice ale filmelor feroelectrice epitaxiale fără plumb și se vor realiza comparații de natură calitativă și cantitativă cu structuri ce conțin filme de AlN, care, deși nu sunt feroelectrice, promit aplicații interesante în domeniul detectorilor piroelectrici.

Titlu Fază: Celule solare pe bază de nanocristale de compuși semiconductori.

Termen: 09.12.2021

Obiective: Obiectivul fazei constă în obținerea și studiul unor celule solare din generația a treia, în configurație de diodă Schottky, pe bază de straturi de nanocristale de GaAs, CdTe.

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

Depunerea unor straturi subtile de nanocristale (cu grosime suficient de mică ca purtătorii fotogenerați să nu sufere recombinări) între electrozii (metal și semiconductor) unei fotodiode Schottky poate astfel mari absorbția luminii solare într-un interval de lungimi de undă larg, lucru care înseamnă o eficiență de conversie sporită. O astfel de structură se comportă similar cu o joncțiune multiplă, dar la un preț de producție substanțial mai mic. Un avantaj direct al structurilor fotovoltaice pe bază de nanocristale este capacitatea de a modifica cu ușurință lățimea benzii interzise prin confinare cuantică, prin simplă modificare a dimensiunii cristalului.

Prepararea de straturi de nanocristale din compuși semiconductori de GaAs și CdTe.

Depunerea prin evaporare termică s-a realizat într-o instalație specifică de tip HochVakuum, cu evaporarea materialului de GaAs sau CdTe din barcuta de W. Grosimea stratului efectiv depus poate fi controlată prin calculul masei depuse, în timp ce dimensiunea nanocristalelor obținute este determinată de condițiile de depunere - viteza de evaporare, nivel de vid, viteza fluxului de gaz inert. Obținerea de nanocristale prin PLD s-a obținut într-un dispozitiv specific, adaptat la un laser de tip YAG:Nd, de tip Quantel Brilliant B, cu module de multiplicare a frecvenței, ce oferă o flexibilitate în alegerea lungimii de undă (266, 355, 532, 1064 nm). Sistemul a fost proiectat și obținut într-o fază anterioară a programului Nucleu și este utilizabil și în tehnica MAPLE. A fost folosită radiația de 532 nm, iar energia pulsului laserului a fost variată între 5 și 30 mJ, durata acestuia fiind de 6 ns. Un dispozitiv optic de concentrare a luminii cu distanța focală de 25 cm a fost folosit pentru a asigura densitatea de energie dorită pe suprafața tintelor semiconductoare de GaAs și CdTe. Ca și tinte au fost folosite

plachete de GaAs achizitionate comercial si discuri de CdTe preparate in cadrul laboratorului nostru din elementele chimice constituinte intr-o instalatie de tip Cambridge MSR6, la presiuni si temperaturi inalte.

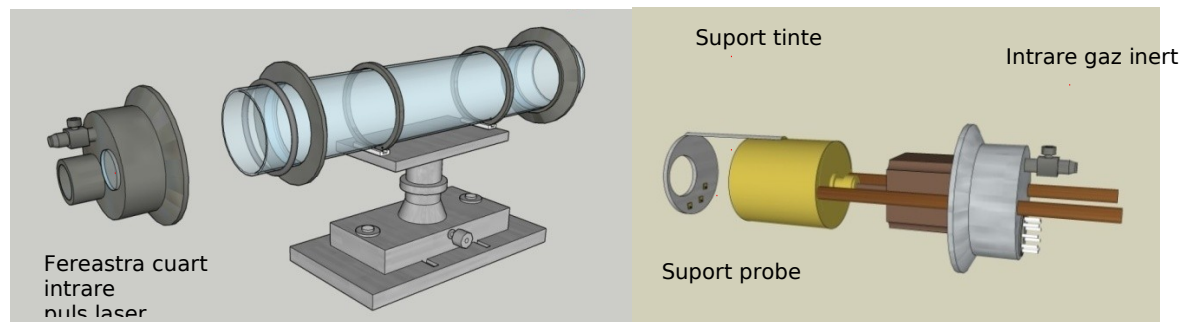


Figura 1. Incinta dedicata pentru obtinerea de nanocristale semiconductoare de GaAs si CdTe

S-au obtinut seturi de probe de tip **Sticla/ITO/NC/Semiconductor/Contact Ohmic**, in care Semiconductorul a fost GaAs si GaSb. GaAs are banda interzisa de aprox. 1.43eV avand maximul de absorbtie in infrarosu apropiat. Prin depunerea sa cu NC de CdTe si de GaAs se preconizeaza marirea coeficientului de absorbtie si in regiunile vizibil si UV ale spectrului solar. GaSb are banda interzisa de aprox. 0.725eV, iar prin depunerea cu straturi de NC semitransparente se preconizeaza acoperirea domeniului 300nm-1.7 μ m in termeni de fotosenzitivitate. Obtinerea unor astfel de structuri a presupus parcurgerea urmatoarelor etape :

- Taierea plachetelor semiconductoare de GaAs si GaSb la dimensiunea dorita (de regula 1cmx1cm)
- Curatare si degresare - tratament cu ultrasunete, fierbere in tricloretilena si spalare in acetona
- Corodare chimica specifica (solutii de HCl, H₂SO₄ sau acid citric, in functie de tipul si orientarea plachetelor), spalare in apa deionizata si depozitare in camera vidata sau in solutie de alcool
- Depunere in vid inalt (10⁻⁶mbar) a contactelor ohmice specifice (200nm Au-Ge-Ni pentru probele de GaAs si 150nm Au-Te pentru probele de GaSb)
- Tratament termic in vid al contactelor ohmice (400-430°C pentru AuGeNi/GaAs si 250-300°C pentru Au-Te/GaSb), timp de 5 minute, urmat de depozitarea in camera vidata sau solutie de alcool
- Depunerea de NC semiconductoare de GaAs sau CdTe prin doua metode – evaporare din barcuta de W si PLD in flux de gaz inert. S-au folosit parametrii stabiliti pe baza masuratorilor de la punctul 1- presiune de gaz inert de 2-10mbar, densitati ale energiei laser in jur de aprox. 5J/cm². La evaporarea termica s-a stabilit un curent de 130-180A in barcuta de depunere pentru a asigura rate de 1-2nm/secunda.
- Tratament termic (la 200°C , 2 minute) doar in cazul probelor obtinute prin evaporare termica pentru a spori probabilitatea formarii aglomerarilor nanometrice si reducerea insulelor cu aspect de strat continuu observate in unele cazuri.
- Asamblarea plachetei de ITO/sticla prin presare si lipire cu araldit izolator de tip 243-S pe margini
- Lipirea firelor de contact cu pasta de Ag si fixarea in suport ceramic cu interfata fotoactiva in sus pentru masuratori electrice si optice.

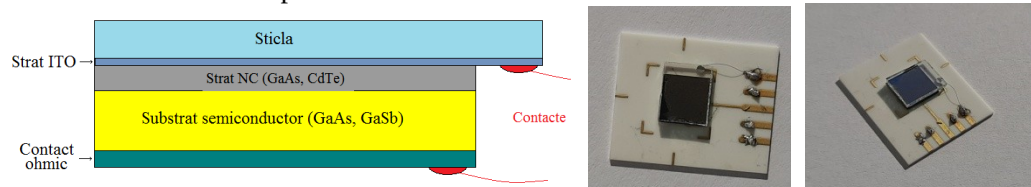


Figura2. Schema si exemple de structuri fotoactive obtinute si montate in suport ceramic

Concluzii și perspective:

O serie de structuri si heterostructuri obtinute prin depuneri de straturi de NC pe suport material semiconductor au fost caracterizate in ceea ce priveste caracteristicile structurale, optice si electrice. Au fost obtinute dispozitive senzitive la radiatia solara cu valori mari ale tensiunii de circuit deschis V_{oc} de peste 400mV

și cu eficiența de conversie solară promitătoare- de aprox. 8%. S-a obținut extinderea răspunsului fotoactiv al celulelor într-un domeniu larg de lungimi de undă ($300\text{nm} \div 1.7\mu\text{m}$).

Rezultatele experimentale obținute pe cele mai eficiente structuri Sticlă/ITO/NC-CdTe/GaAs/Au-Ge-Ni vor face obiectul unei lucrări trimise spre publicare, cu titlul "Structural properties of CdTe Nanocrystals /n-GaAs interface and their role in increasing the photosensitivity in the UV field of solar spectrum".

O serie de îmbunătățiri și optimizări ale dispozitivelor pot și vor fi aplicate în funcție și de proiectele viitoare în care va fi implicat laboratorul nostru: pasivarea NC semiconductoare în timpul obținerii acestora, îmbunătățirea condițiilor de depunere prin implementarea tehnicii Plasma Assisted Deposition. În același timp, efectele de suprafață devin notabile odată cu scăderea dimensiunii cristalului deoarece numărul de atomi de suprafață devine comparabil cu cel din cristalit. Starile de suprafață sunt capcane intermediare ce participă în reconstrucția acestora sau la legături chimice cu atomi din mediul înconjurător. Prin urmare, pentru îmbunătățirea eficienței de conversie se impun studii suplimentare asupra suprafețelor nanocristalelor dar și abordarea in-situ a proceselor de obținere și caracterizare.

Titlu Fază: Creșterea stabilității celulelor prin încapsularea stratului de perovskit de tip MAPI

Termen: 09.12.2021

Obiective: Performanța celulelor solare perovskitice a crescut cu o viteză fără precedent, iar în acest moment eficiența acestora depășește 20%. În prezent, stabilitatea slabă a celulelor solare perovskitice reprezintă o barieră pentru comercializarea lor. În particular, umiditatea, temperaturile ridicate și expunerea la radiații UV contribuie la degradarea perovskitului hibrid de tip $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ sau $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3\text{-xCl}_x$ prin dizolvarea iodurii de metil amoniu pentru a produce PbI_2 . Prin urmare, obiectivul acestui studiu este de a realiza încapsularea de tip "core-shell" a stratului perovskitic pentru a preveni degradarea celulelor solare de tip perovskitic. Investigarea relației dintre proprietățile fizico-chimice ale mai multor încapsulanți de tip $\text{CsPbBr}_3/\text{CsPb}_2\text{Br}_5$ și eficiența celulelor solare, precum și capacitatea lor de a îmbunătăți stabilitatea filmelor $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3\text{-xCl}_x$ va fi studiată în cadrul acestui proiect.

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

În prezenta fază de proiect ne-am propus utilizarea de structuri inovatoare de tip *core-shell*, astfel reducând defectele de suprafață și îmbunătățirea stabilității perovskitilor utilizați ca strat absorbant în celulele solare. Astfel că, de o importanță deosebită este creșterea unei cochilii (shell) robuste, cu o suprafață mai mare sau materiale cu bandă interzisă mai mică peste nucleul (core) NC pentru a forma o structură nucleu/cochilie (*core-shell*), dispozitivele finale arătând așa cum sunt schematic reprezentate în Figura 1. Așa cum se observă din Figura 1, bazându-ne pe experiența în fabricarea de celule solare și rezultatele bune obținute folosind perovskitul FAMA dopat cu 10%K (cu formula $\text{K}_{0.1}\text{FA}_{0.7}\text{MA}_{0.2}\text{PbI}_{2.8}\text{Cl}_{0.2}$) am decis să folosim această compoziție drept *shell*, în timp ce perovskitul anorganic pe baza de Cs să îl folosim drept *core*. Mai mult decât atât, în funcție de compoziția perovskitului anorganic, am decis să studiem atât formarea de perovskiti clasici cu structură 3D (Figura 1, stânga) cât și perovskiti cu structură 2D (Figura 1, dreapta).

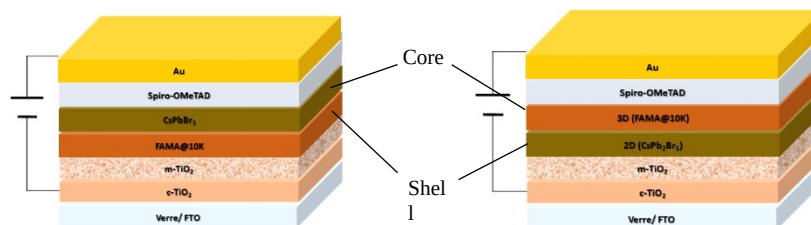


Figura 1. Reprezentarea schematică a dispozitivelor fabricate în acest proiect

5.2. Metode experimentale generale de obținere a celulelor solare

Substraturile, constând din sticlă acoperită cu un strat conductiv transparent de FTO (15 ohm/sq) au fost corodate cu pulbere de Zn amestecată cu HCl, spălate cu detergent și apoi apă, acetonă și 2-propanol prin ultrasonare 10 min și supuse unui tratament în plasmă de O₂ (0,7 mbar) 10 min pentru îndepărtarea reziduurilor organice.

Pentru stratul selectiv de electroni, s-au depus consecutiv un strat compact și apoi unul mezoporos de TiO₂ astfel:

TiO₂compact: filme depuse prin *spray pyrolysis*, folosind un pistol manual, 20 de pulverizări consecutive a unei soluții de Ti(iProp)₂AcAc₂ în izopropanol (1:10) cu O₂ (presiune de gaz 2 bar) pe substraturi, menținute la 450°C la 15 - 20 cm distanță, tratament 450°C/30 min pe plită.

TiO₂mezoporos: filme depuse prin *spray coating*, automatic, folosind 30 de pulverizări a unei dispersii ultrasonate de nanoparticule de TiO₂ în etanol (1:100) cu O₂ (2 bar) pe substraturi menținute la 100°C la 15 - 20 cm distanță. A urmat un scurt tratament termic de uscare la 100°C/5 min pe plită, și un tratament de sinterizare la 500°C/1h în cuptorul de calcinare.

După câteva studii realizate asupra filmului de perovskit, în care s-au variat diferiți parametri (raportul dintre reactanți, temperatură, solvenți) cu scopul de a verifica fezabilitatea ideii, a fost realizată fabricarea dispozitivelor. Dintre solvenții utilizați amintim: dimetilformamida (DMF), dimetilsulfoxid (DMSO), izopropanol (IPA), acetat de etil (AE), toluen (TOL), clorbenzen (CB). Pentru aceasta, s-au ales cele mai bune condiții determinate în cadrul acestei faze:

- **Soluție standard FAMA:** Soluția de perovskit K_{0.1}FA_{0.7}MA_{0.2}PbI_{2.8}Cl_{0.2} (FAMA@10K) (1,45 M), a fost preparată prin amestecarea MAI, FAI, KI, PbI₂ și PbCl₂ în amestec de solvenți DMF/DMSO (8,2:1), soluțiile au fost agitate 1 h la temperatura camerei înainte de utilizare.
- **Soluția S1:** Soluția de perovskit CsPbBr₃ a fost preparată prin amestecarea a 0,106 g de CsBr și 0,183 g de PbBr₂ în amestec DMSO/AE (3,3 g: 0,9 g), soluția a fost agitată 1 h la 70 °C înainte de utilizare.
- **Soluția S2:** Soluția de perovskit CsPbBr₃ a fost preparată prin amestecarea a 0,106 g de CsBr și 0,183 g de PbBr₂ în 1,1 g DMSO, soluția a fost agitată 1 h la 70 °C înainte de utilizare.
- **Soluția S3:** Soluția de perovskit CsPbBr₃ a fost preparată prin amestecarea a 0,106 g de CsBr și 0,366 g de PbBr₂ în 1,1 g DMSO, soluția a fost agitată 1 h la 70 °C înainte de utilizare.
- **Soluția S1':** 0,204 ml de soluție standard FAMA + 0,096 ml de soluție S1 (CsPbBr₃ în DMSO/AE).
- **Soluția S2':** 0,204 ml de soluție standard FAMA + 0,096 ml de soluție S2 (CsPbBr₃ în DMSO).
- **Soluția S3':** 0,204 ml de soluție standard FAMA + 0,096 ml de soluție S3 (CsPbBr₃ în DMSO).

Celulelor solare preparate în cadrul acestui proiect le-au fost măsurate eficiențele energetice, iar rezultatele sunt prezentate în Tabelul 1.

Tabel 1. Caracteristicile fotovoltaice ale celulelor solare fabricate.

Celulă	Soluția precursoră + antisolvent	Voc (V)	Jsc (mA/cm ²)	FF (%)	Rs (Ω cm ²)	Rsh (Ω cm ²)	PCE (%)
S-FAMA_1	Standard solution +CB	1.022	19.7	54	13	1362	10.94
S-FAMA_2		1.022	20.7	52	13	965	10.96
Med.		1.022	20.2	53	13	1163	10.95
A3	S1` + IPA	0.847	14.4	48	15	461	5.95
A5	S1` + CB	0.938	19.4	53	12	555	9.62
A6		0.941	18.3	49	15	373	8.53
Med.		0.940	18.9	51	14	464	9.08
A7	S2` + Tol	0.975	14.8	57	13	273	8.28

A8		0.968	16.8	54	11	438	8.83
Med.		0.972	15.8	56	12	356	8.56
A11	S2` + IPA	0.977	14.5	52	17	661	7.45
A14	S3` + Tol	1.010	12.4	42	32	660	5.29
A15*		0.685	5.2	24	95	101	0.87
A18	S3` + IPA	1.023	11.0	30	86	244	3.36
A19	S3` + CB	0.997	11.6	36	57	712	4.22
A21		0.964	12.2	34	43	436	4.11
Med.		0.981	11.9	35	50	574	4.17

- *proba exclusă din statistică

Concluzii și perspective:

În această fază s-a reușit încapsularea stratului activ de perovskit hibrid din celulele solare cu un perovskit de tip 3D și 2D. Cele mai bune performanțe s-au obținut pe celula solară care conținea perovskiți 3D/3D (celula A5) care a prezentat eficiențe de aproape 11 %, dar cel mai important lucru este că celulele 3D/2D cu structura *core-shell* au prezentat o stabilitate mult mai mare.

În cadrul acestei faze s-a publicat o lucrare în *Solar Energy Materials and Solar Cells* 227 (2021) 111096 (IF=7,2), un capitol de carte acceptat spre publicare în Elsevier și o altă lucrare, care este în curs de preparare.

Având în vedere rezultatele obținute în cadrul acestei faze de proiect, precum și gradul ridicat de implementare atins, putem aprecia că activitățile de cercetare desfășurate au satisfăcut integral obiectivele propuse.

Titlu Fază: Formalisme de transport in sisteme cu dimensionalitate redusa (partea a)

Termen: 31.08.2021

Obiective: Prezentare introductiva a fenomenelor de transport in regim mezosopic ca o problema de sisteme cuantice deschise in interactie

- Prezentarea formalismului Landauer-Buttiker (deducere, discutie a regimului de valabilitate); Prezentarea metodei ecuației master (deducere pentru sisteme in interactie in regim non-markovian); Prezentarea unor metode de calcul pentru starile multiparticula si pentru descrierea efectelor de interactie in sisteme cu dimensionalitate redusa.

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

Tutorialul pe care il propunem contine doua doua parti. In prima parte care face obiectul acestei faze s-au prezentat la un nivel cat mai pedagogic cateva metode pentru studiul unor fenomene de transport cuantic in nanosisteme functionand in regimuri diferite. A doua parte va fi finalizata in faza urmatoare si are ca scop exemplificarea metodelor prin calcule teoretice si/sau numerice cat mai elementare si discutarea rezultatelor. Scopul tutorialului nu este de a reproduce un material deja existent in cateva monografii accesibile specialistilor ci de a oferi un ghid scurt si cat mai accesibil asupra catorva fenomene de transport cuantic precum si o clasificare transparenta a metodelor teoretice relevante.

In continuare prezentam pe scurt structura tutorialului, evidentiind modul coerent de prezentare al metodelor teoretice precum si domeniul de valabilitate al acestora.

Dezvoltarea initiala a acestor metode depinde in mod esential de doua aspecte: i) de modelul de transport considerat si ii) de aproximatiile asumate. In cadrul formalismului LB se presupune ca electronii care tuneleaza prin proba nu interactioneaza iar deducerea formulei LB, in varianta initiala, nu presupune nici un calcul microscopic pe baza unui Hamiltonian. Mai mult, caderea de potential (bias) in urma caruia se stabileste curentul

de sarcina este asigurata de potentialele chimice ale celor doua rezervoare. Acestea sunt mult mai mari decat proba mezoscopica si pot fi considerate in stare de echilibru termodinamic.

Este de remarcat aici o diferenta esentiala fata de scenariul de transport considerat în teoria de transport linear: in acest caz sistemul nu este legat la rezervoare ci supus unui câmp electric extern aplicat adiabatic. Acest camp este absent in formularea LB. Corespondenta dintre cele doua abordari a facut obiectul unor studii detaliate, in prezent fiind demonstrat faptul ca formula Kubo adaptata la sisteme mezoscopice conduce la formula LB, transmitanta fiind data de functia Green a probei calculata in prezenta firelor.

Celelalte doua formalisme (metoda ecuatiei master si teoria functiilor Green de neechilibru) pornesc de la acelasi scenariu de transport: proba finita este descrisa de un Hamiltonian care include interactia electron-electron si este initial decuplata de la rezervoarele de particule infinite care sunt caracterizate de electroni liberi si de potentiale chimice diferite; la momentul t_0 se stabileste cuplajul dintre proba si fire, ceea ce conduce la stabilirea unui curent tranzitoriu. În anumite conditii sistemul atinge starea stationara in limita timpilor mari.

In cadrul tutorialului se arata ca metodele mentionate mai sus pot fi adaptate si deduse într-un mod coerent pornind de la ecuatie de evolutie a operatorului statistic a unui sistem cuantic cuplat la rezervoare de particule prin asa-numitul Hamiltonian de transfer/tunelare. Acest fapt nu este atat de surprinzator avand in vedere ca si ecuatie Boltzmann poate fi dedusa din ecuatie Liouville von Neumann [5]. Ulterior diferentierea metodelor se face natural in functie de aproximatiile folosite: taria interactiei coulombiene, regimul de cuplaj dintre proba si fire, valoarea bias-ului aplicat.

Concluzii și perspective:

Obiectivele prevazute in planul de realizare au fost indeplinite in totalitate. Forma finala a tutorialului va fi finalizata odata cu includerea rezultatelor prevazute in faza a II-a.

Titlu Fază: Obținerea timpului de viața a muonului sub acțiunea unui laser de mare putere

Termen: 09.12.2021

Obiective: Deducerea formulei de viața cu includerea interacției laser

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

Pentru a putea investiga in mod cât mai precis efectele unui laser de mare putere asupra timpului de viață (sau, echivalent, asupra lărgimii de dezintegrare), s-a considerat un laser polarizat circular, ce emite fotoni de energie mică, dar cu o intensitate mare.

Concluzii și perspective:

În cadrul acestei etape s-a obținut expresia pentru una dintre corecțiile asupra timpului de viață al muonului atunci când acesta este supus influenței unui laser de mare putere. Expresia obținută este în acord cu estimările mai vechi, însă corecția totală necesită dezvoltarea unui cod numeric pentru calcularea termenilor ce nu pot fi calculati analitic.

Din cele prezentate mai sus rezultă că **obiectivele etapei de cercetare au fost îndeplinite integral**. Rezultatele obținute pun bazele continuării studiului prin dezvoltarea unui cod numeric pentru calcularea termenului al doilea din ecuația (16).

$$\int dE \int dz \Theta(Q^2) = \int_{m_e}^{\frac{M}{2}} dE \int_{-1}^1 dz + \int_{\frac{M}{2}}^{\frac{M}{2} + l\omega} dE \int_{z_L(E)}^1 dz. \quad ()$$

Titlu Fază: Aplicatii ale metodelor teoretice pentru descrierea fenomenelor de transport

Termen: 09.12.2021

Obiective: Studiul efectelor de interactie asupra proprietatilor de transport in doturi cuantice (blocada Coulombiana, diagrama de stabilitate, efecte de 'sensing')

- Descrierea transportului tranzitoriu si a dinamicii starilor excitate
- Introducere in transportul cuantic in sisteme active optic

- Prezentarea unor fenomene noi in sisteme nanoelectromecanice (regim de transport vibronic)
- Descrierea unor fenomene de interferenta cuantica si/sau a unor efecte de corelatie in sisteme cu dimensionalitate redusa.

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

A doua parte a tutorialului este dedicata în întregime aplicațiilor abordărilor teoretice prezentate în prima parte (metoda ecuației master și formalismul funcțiilor de neechilibru). Mai precis, după introducerea formală a metodelor se trece la descrierea unor sisteme cuantice deschise specifice (de exemplu sisteme hibride dot cuantic +cavitate optica, sisteme nano-electromecanice sau nanomagnetii moleculari și artificiali). În continuare descriem pe scurt secțiunile noi din tutorial ce contin aceste aplicații. Precizăm ca deși exemplele prezentate nu reprezintă rezultate originale metodele numerice folosite sunt elaborate de membrii echipei proiectului și pot fi puse la dispoziția studenților sau asistentilor de cercetare.

Concluzii și perspective:

Obiectivele prevăzute în planul de realizare au fost îndeplinite în totalitate. Forma finală a tutorialului va fi finalizată în cursul acestui an și va fi accesibilă în format electronic pe site-ul CIFRA. Considerăm ca prezentul tutorial poate fi util celor care sunt interesați de studiul teoretic al sistemelor cuantice deschise și, într-o oarecare măsură, suplineste lipsa acestui domeniu esențial în fizica actuală din programa studiilor masterale sau doctorale ale universitatilor din România.

Titlu Fază: Dezvoltarea unor coduri numerice și calculul timpului de viață al muonului în prezența unui câmp laser

Termen: 09.12.2021

Obiective: calculul timpului de viață al muonului în prezența unui câmp laser monocromatic.

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

Am dezvoltat codul numeric necesar, cu ajutorul MATHEMATICA, folosind cuadraturi Gauss-Legendre în 15 puncte. Pentru a compara rezultatele, vom face câteva aproximații. Pentru un laser cu parametrii

$ea = 1.5 \times 10^{-4} \text{ MeV}$ și $\omega = 1 \text{ eV}$, argumentul funcțiilor Bessel, D , variază între 0 și $\frac{1}{ea}$. Funcțiile Bessel devin

foarte mici atunci când indicele, l , ajunge să fie mai mare decât argumentul. În consecință suma din Error: Reference source not found este practic limitată la $|l| \leq D$. Cum energia totală a fotonilor schimbați este foarte mică în comparație cu masa muonului în acest domeniu de l , putem face o dezvoltare în serie Taylor. Notăm

$$G(\omega, l, E) = \int dE E \beta \int_{z_L(E)}^1 dz |T_l|^2,$$

iar corecția la rata de dezintegrare devine

$$\frac{\Gamma^2}{\Gamma} = \frac{1}{128G^2} \frac{8}{M} \sum_{l=-\infty}^{\infty} [G(\omega, l, E = \frac{M}{2} + l\omega) - G(\omega, l, E = \frac{M}{2})].$$

Dezvoltăm în serie Taylor primul termen al sumei și obținem (suprimând parametrii ω și l)

$$G\left(\frac{M}{2} + l\omega\right) = G\left(\frac{M}{2}\right) + l\omega \frac{dG}{dE} \Big|_{E=\frac{M}{2}} + \dots$$

În acest fel, limitele de integrare din nou nu depind de l . Vom opri dezvoltarea după al doilea termen, și calculăm derivata

$$\frac{dG}{dE} \Big|_{E=\frac{M}{2}} = \frac{1}{128G^2} \frac{M}{2} \int_{-1}^1 |T_l|^2$$

iar corecția devine

$$\frac{\Gamma^2}{\Gamma} = \frac{1}{128G^2} \frac{4\omega}{M^5} \int_{-1}^1 \sum_{l=-\infty}^{\infty} l |T_l|^2.$$

Datorită proprietăților funcțiilor Bessel (relația de recurență și sumele pe toți indicii la argument fixat), doar termenii din liniile 3,4,7,9,10 și 12 ai Error: Reference source not found sunt nenuli. Se poate arăta că forma finală a corecției în această aproximație este

$$\frac{\Gamma^2}{\Gamma} = \frac{8e^2 a^2}{M^2} \left\{ \left(1 + \frac{3\omega}{M} + \frac{4\omega^2}{M} \right) \ln \frac{M}{m_e} - 1 - 4 \frac{\omega}{M} - 2 \frac{\omega^2}{M^2} \right\}$$

Remarcăm că ordinul de mărime al corecției din ecuația de mai sus este identic cu cel din ecuația Error: Reference source not found din raportul detaliat. În consecință, cu tehnologia disponibilă în prezent, timpul de viață al muonului **nu poate fi modificat sesizabil** cu ajutorul unui laser de intensitate mare, circular polarizat, ce emite fotoni de energie joasă.

Pentru a compara rezultatele codului nostru cu formula de mai sus, facem următoarea notație $R \stackrel{\text{def}}{=} \Gamma^2/\Gamma$ folosind ecuația de mai sus, și R_N este valoarea corecției utilizând limitele fără aproximații. Rezultatul este prezentat în Tabelul 1, unde pe prima coloană se află valoarea maximă a lui $|l|$ folosită în cod iar pe a doua se află raportul R/R_N în procente. Estimările noastre pentru eroare în R_N sunt $\epsilon(R_N) \simeq 1.2 \times 10^{-2} R_N$.

Tabel 1: Raportul între calculul aproximativ și cel exact al corecției ratei de dezintegrare.

$ l_{\max} $	R/R_N (%)
10	93.2
100	95.0
1000	98.9
5000	99.5

Concluzii și perspective:

În cadrul acestei etape s-a dezvoltat un cod numeric în limbajul MATHEMATICA, pentru calcularea corecțiilor asupra timpului de viață al muonului atunci când acesta este supus influenței unui laser de mare putere. Rezultatele numerice sunt în accord cu estimările mai vechi ce foloseau diferite aproximații pentru a obține un rezultat analitic.

Din cele prezentate mai sus rezultă că **obiectivele etapei de cercetare au fost îndeplinite integral**. Rezultatele obținute ajută la alegerea viitoarelor domenii de studiu a interacției laser cu materia, oferind o privire de ansamblu asupra modificărilor pe care un câmp laser intens le poate aduce într-un proces de dezintegrare.

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

Tip	Nr. realizat în anul 2020
Documentații	6
Studii	9
Lucrări	187
Planuri	-
Scheme	-
Altele asemenea (se vor specifica)	-

Din care:

4.2.1. Lucrări științifice publicate în jurnale cu factor de impact relativ ne-nul (2020):

Nr	Titlul	Jurnal	Autori	FI	AIS	DOI	Q-JCR	Q-ESI
1	Electro-active properties of nanostructured films of cytosine and guanine nucleobases	NANOTECHNOLOGY, 32 , 415702 (2021)	Socol, M; Trupina, L; Galca, AC; Chirila, C; Stan, GE; Vlaicu, AM; Stanciu, AE; Boni, AG; Botea, M; Stanculescu, A; Pintilie, L; Borca, B	3.874	0.677	10.1088/1361-6528/ac10e4	Q2	Q1
2	Accidental Impurities in Epitaxial Pb(Zr _{0.2} Ti _{0.8})O ₃ Thin Films Grown by Pulsed Laser Deposition and Their Impact on the Macroscopic Electric Properties	NANOMATERIALS, 11 , 1177 (2021)	Boni, GA; Chirila, CF; Stancu, V; Amarande, L; Pasuk, I; Trupina, L; Istrate, CM; Radu, C; Tomulescu, A; Neatu, S; Pintilie, I; Pintilie, L	5.076	0.756	10.3390/nano11051177	Q1	Q1
3	Spectral analysis, chiral disorder and topological edge states manifestation in open non-Hermitian Su-Schrieffer-Heeger chains	PHYSICS LETTERS A, 387 , 127030 (2021)	Ostahie, B; Aldea, A	2.654	0.486	10.1016/j.physleta.2020.127030	Q2	Q1
4	Spin asymmetry originating from densities of states: Criterion for ferromagnetism, structures and magnetic properties of 3d metals from crystal field based DOSs	RESULTS IN PHYSICS, 25 , 104241 (2021)	Teodorescu, CM	4.476	0.641	10.1016/j.rinp.2021.104241	Q1	Q1
5	Structural Details of BaTiO ₃ Nano-Powders Deduced from the Anisotropic XRD Peak Broadening	NANOMATERIALS, 11 , 1121 (2021)	Pasuk, I; Neatu, F; Neatu, S; Florea, M; Istrate, CM; Pintilie, I; Pintilie, L	5.076	0.756	10.3390/nano11051121	Q1	Q1
6	Ferroelectricity in thin films driven by charges accumulated at interfaces	PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 23 , pp+- (2021)	Teodorescu, CM	3.676	0.823	10.1039/d0cp05617k	Q1	Q1
7	Zn-Fe-oxide nanostructures of different iron concentrations for multifunctional applications: properties and precursor influence	PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS, 23 , pp+16107-16127 (2021)	Mihalache, V; Negrila, C; Mercioniu, I; Iacob, N; Kuncser, V	3.676	0.823	10.1039/d1cp01002f	Q1	Q1
8	On the pinning force in high density MgB ₂ samples	SCIENTIFIC REPORTS, 11 , 5951 (2021)	Sandu, V; Ionescu, AM; Aldica, G; Grigoroscuta, MA; Burdusel, M; Badica, P	4.380	1.285	10.1038/s41598-021-85209-2	Q1	Q1
9	Homogeneous versus Inhomogeneous	NANOMATERIALS, 11 , 2124 (2021)	Pintilie, L; Boni, GA; Chirila, CF; Stancu, V;	5.076	0.756	10.3390/nano110	Q1	Q1

	Polarization Switching in PZT Thin Films: Impact of the Structural Quality and Correlation to the Negative Capacitance Effect		Trupina, L; Istrate, CM; Radu, C; Pintilie, I			82124		
10	Hybrid Nanocomposite Thin Films for Photovoltaic Applications: A Review	NANOMATERIALS, 11 , 1117 (2021)	Socol, M; Preda, N	5.076	0.756	10.3390/nano11051117	Q1	Q1
11	Electronic and transport properties of the dual-emitter organometallic compound IrQ(ppy)(2)	JOURNAL OF ORGANOMETALLIC CHEMISTRY, 942 , 121814 (2021)	Polosan, S	2.369	0.307	10.1016/j.jorganc hem.2021.121814	Q2	Q1
12	Intrinsic Dielectric Loss in Zr _{0.8} Sn _{0.2} TiO ₄ Ceramics Investigated by Terahertz Time Domain Spectroscopy	MATERIALS, 14 , 216 (2021)	Nedelcu, L; Geambasu, CD; Enculescu, M; Banciu, MG	3.623	0.595	10.3390/ma14010216	Q1	Q1
13	Spin-vibron coupling effects in single-molecule magnets grafted to a nanoelectromechanical system	PHYSICAL REVIEW B, 104 , 075441 (2021)	Moldoveanu, V; Dragomir, R	4.036	0.976	10.1103/PhysRevB.104.075441	Q2	Q1
14	Structural, magneto-optical and dielectric properties of phosphate tellurite glasses	MATERIALS RESEARCH BULLETIN, 143 , 111455 (2021)	Polosan, S; Ganea, P; Nutescu, A	4.641	0.504	10.1016/j.matresbull.2021.111455	Q2	Q1
15	Magnetic and Magnetostrictive Properties of Ni ₅₀ Mn ₂₀ Ga ₂₇ Cu ₃ Rapidly Quenched Ribbons	MATERIALS, 14 , 5126 (2021)	Sofronie, M; Tolea, M; Popescu, B; Enculescu, M; Tolea, F	3.623	0.595	10.3390/ma14185126	Q1	Q1
16	Negative capacitance in epitaxial ferroelectric capacitors evidenced by dynamic dielectric characterization	MATERIALS TODAY COMMUNICATIONS, 26 , 102076 (2021)	Boni, GA; Chirila, C; Filip, LD; Pintilie, I; Pintilie, L	3.383	0.507	10.1016/j.mtcomm.2021.102076	Q2	Q2
17	Structural, magnetic and magnetostrictive properties of the ternary iron-palladium-silicon ferromagnetic shape memory ribbons	APPLIED PHYSICS A-MATERIALS SCIENCE & PROCESSING, 127 , 168 (2021)	Sofronie, M; Popescu, B; Enculescu, M	2.584	0.333	10.1007/s00339-021-04315-0	Q2	Q1
18	Fabrication of ZnO and TiO ₂ Nanotubes via Flexible Electro-Spun Nanofibers for Photocatalytic Applications	NANOMATERIALS, 11 , 1305 (2021)	Enculescu, M; Costas, A; Evanghelidis, A; Enculescu, I	5.076	0.756	10.3390/nano11051305	Q1	Q1
19	Spin asymmetry	RESULTS IN	Teodorescu, CM	4.476	0.641	10.1016/	Q1	Q1

	originating from densities of states: Criterion for ferromagnetism, structures and magnetic properties of 3d metals from crystal field based DOSs (vol 25, 104241, 2021)	PHYSICS, 27 , 104474 (2021)				j.rinp.2021.104474		
20	Long- and short-range order in the Ni ₅₂ Co ₂ Fe ₂₀ Ga ₂₆ ferromagnetic Heusler alloy	JOURNAL OF APPLIED CRYSTALLOGRAPHY, 54 , pp+1207-1216 (2021)	Macovei, D; Tolea, F	3.304	1.321	10.1107/S1600576721006415	Q2	Q1
21	Multifunctional GaFeO ₃ Obtained via Mechanochemical Activation Followed by Calcination of Equimolar Nano-System Ga ₂ O ₃ -Fe ₂ O ₃	NANOMATERIALS, 11 , 57 (2021)	Diamandescu, L; Tolea, F; Feder, M; Vasiliu, F; Mercioniu, I; Enculescu, M; Popescu, T; Popescu, B	5.076	0.756	10.3390/nano11010057	Q1	Q1
22	An antibody-based amperometric biosensor for 20S proteasome activity and inhibitor screening dagger	ANALYST, 146 , pp+3216-3224 (2021)	Barsan, MM; Diculescu, VC	4.616	0.816	10.1039/d0an02426k	Q1	Q1
23	CO adsorption and oxidation at room temperature on graphene synthesized on atomically clean Pt(001)	CATALYSIS TODAY, 366 , pp+155-163 (2021)	Apostol, NG; Bucur, IC; Lungu, GA; Tache, CA; Teodorescu, CM	6.766	1.013	10.1016/j.cattod.2020.02.006	Q1	Q1
24	Spectroscopic studies on photodegradation of atorvastatin calcium	SCIENTIFIC REPORTS, 11 , 15338 (2021)	Oprica, M; Iota, M; Daescu, M; Fejer, SN; Negriila, C; Baibarac, M	4.380	1.285	10.1038/s41598-021-94693-5	Q1	Q1
25	Highly Conductive Carbon-Based Thin Films Produced by Low-Energy Electron Irradiation	JOURNAL OF ELECTRONIC MATERIALS, 50 , pp+5529-5541 (2021)	Ciobotaru, CC; Ciobotaru, IC; Iosub, DG; Polosan, S	1.938	0.283	10.1007/s11664-021-09058-5	Q3	Q1
26	Comparison between lead free BaTiO ₃ /PDMS and doped- PZT/PDMS composite on ferroelectric characteristics	DIGEST JOURNAL OF NANOMATERIALS AND BIOSTRUCTURES, 16 , pp+747-755 (2021)	Amarande, L; Stancu, V; Botea, M; Toma, V; Ciobanu, R; Pintilie, L	0.963	0.131		Q4	Q3
27	Optical Evidence for the Assembly of Sensors Based on Reduced Graphene Oxide and Polydiphenylamine for the Detection of Epidermal Growth Factor Receptor	COATINGS, 11 , 258 (2021)	Baibarac, M; Daescu, M; Fejer, SN	2.881	0.405	10.3390/coatings11020258	Q2	Q2

28	Anisotropic Photoluminescence of Poly(3-hexyl thiophene) and Their Composites with Single-Walled Carbon Nanotubes Highly Separated in Metallic and Semiconducting Tubes	MOLECULES,26,294 (2021)	Baibarac, M; Arzumanyan, G; Daescu, M; Udrescu, A; Mamatkulov, K	4.412	0.694	10.3390/molecules26020294	Q2	Q1
29	Magnetism and epsilon-tau Phase Transformation in MnAl-Based Nanocomposite Magnets	NANOMATERIALS,11,896 (2021)	Crisan, AD; Leca, A; Bartha, C; Dan, I; Crisan, O	5.076	0.756	10.3390/nano11040896	Q1	Q1
30	Experimental tuning of AuAg nanoalloy plasmon resonances assisted by machine learning method	APPLIED SURFACE SCIENCE,567,150802 (2021)	Kozioł, R; Lapinski, M; Syty, P; Sadowski, W; Sienkiewicz, JE; Nurek, B; Maraloiu, VA; Koscielska, B	6.707	0.873	10.1016/j.apsusc.2021.150802	Q1	Q1
31	Redox Mechanism of Azathioprine and Its Interaction with DNA	INTERNATIONAL JOURNAL OF MOLECULAR SCIENCES,22,6805 (2021)	Bunea, MC; Diclescu, VC; Enculescu, M; Iovu, H; Enache, TA	5.924	1.123	10.3390/ijms22136805	Q1	Q1
32	Structural, electrical properties and photoluminescence analyses of the terbium doped barium titanate	JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS,878,160380 (2021)	Cernea, M; Secu, M; Radu, R; Ganea, P; Surdu, VA; Trusca, R; Vasile, ET; Secu, EC	5.316	0.716	10.1016/j.jallcom.2021.160380	Q1	Q1
33	Biocompatibility and Antibiofilm Properties of Samarium Doped Hydroxyapatite Coatings: An In Vitro Study	COATINGS,11,1185 (2021)	Nica, IC; Popa, M; Marutescu, L; Dinischiotu, A; Iconaru, SL; Ciobanu, SC; Predoi, D	2.881	0.405	10.3390/coatings11101185	Q2	Q2
34	A comparative investigation of hetero-epitaxial TiC thin films deposited by magnetron sputtering using either hybrid DCMS/HiPIMS or reactive DCMS process	APPLIED SURFACE SCIENCE,537,147903 (2021)	Zoita, NC; Dinu, M; Kiss, AE; Logofatu, C; Braic, M	6.707	0.873	10.1016/j.apsusc.2020.147903	Q1	Q1
35	Optical Properties of Composites Based on Poly(o-phenylenediamine), Poly(vinylene fluoride) and Double-Wall Carbon Nanotubes	INTERNATIONAL JOURNAL OF MOLECULAR SCIENCES,22,8260 (2021)	Baibarac, M; Daescu, M; Matei, E; Nastac, D; Cramariuc, O	5.924	1.123	10.3390/ijms22158260	Q1	Q1
36	The effect of fullerene layer on the aggregates formation in amyloid beta Langmuir-Blodgett	APPLIED SURFACE SCIENCE,537,147800 (2021)	Breazu, C; Rasoga, O; Socol, M; Ganea, P; Tite, T; Matei, E; Stanculescu, F;	6.707	0.873	10.1016/j.apsusc.2020.147800	Q1	Q1

	films		Stanculescu, A					
37	Hydrocarbons detection using surface plasmon resonance with As ₂ S ₃ thin film waveguide	CHALCOGENIDE LETTERS, 18 , pp+535-540 (2021)	Baschir, L; Miclos, S; Savastru, D; Simandan, ID; Popescu, AA	0.885	0.138		Q4	Q4
38	Pyruvate Oxidase Biosensors Based on Glassy Carbon Electrodes Modified with Carbon Nanotubes and Poly(Neutral Red) Synthesized in Ethaline Deep Eutectic Solvent	ELECTROANALYSIS, pp+- ()	Leote, RJB; Ghica, ME; Brett, CMA	3.223	0.443	10.1002/elan.202100164	Q2	Q2
39	Argon pressure dependent optoelectronic characteristics of amorphous tin oxide thin films obtained by non-reactive RF sputtering process	JOURNAL OF MATERIALS SCIENCE-MATERIALS IN ELECTRONICS, 32 , pp+12308-12317 (2021)	Ziani, N; Galca, AC; Belkaid, MS; Stavarache, I	2.478	0.283	10.1007/s10854-021-05861-2	Q3	Q1
40	Partially-oriented MgB ₂ superconducting bulks with addition of B ₄ C and cubic BN obtained by slip casting under high magnetic field and spark plasma sintering	MATERIALS RESEARCH BULLETIN, 134 ,1111103 (2021)	Grigoroscuta, MA; Aldica, G; Pasuk, I; Burdusel, M; Sandu, V; Kuncser, A; Suzuki, TS; Vasyilkiv, O; Badica, P	4.641	0.504	10.1016/j.matresbull.2020.111103	Q2	Q1
41	Influence of Viscosity on Radial Diffusion of Fluids in Paper Substrates	2021 12TH INTERNATIONAL SYMPOSIUM ON ADVANCED TOPICS IN ELECTRICAL ENGINEERING (ATEE),, pp+- (2021)	Botta, D; Magos, I; Balan, C	not available	not available	10.1109/ATEE52255.2021.9425224	not available	not available
42	Effects of the Severe Plastic Deformation on the Magnetic Properties of Zr ₁₃ Co ₈₇ Ribbons	METALLURGICAL AND MATERIALS TRANSACTIONS A-PHYSICAL METALLURGY AND MATERIALS SCIENCE,, pp+- ()	Popescu, B; Palade, P; Sofronie, M; Kuncser, A; Gurau, C; Gurau, G; Tolea, F	2.556	0.518	10.1007/s11661-021-06507-y	Q1	Q1
43	Immobilized Antibodies on Mercaptophenylboronic Acid Monolayers for Dual-Strategy Detection of 20S Proteasome	SENSORS, 21 ,2702 (2021)	Barsan, MM; Sanz, CG; Onea, M; Diculescu, VC	3.576	0.584	10.3390/s21082702	Q1	Q1
44	Antioxidant activity of thirty-six peppers varieties and vasorelaxant of selected varieties	FOOD BIOSCIENCE, 41 ,100989 (2021)	Machado, FB; de Mace, IYL; Campos, HM; Moreno, EKG; Silva, MFB; de Oliveira, JR; Ramalho, RRF; Nascimento, AD; Vaz, BG; da Cunha, LC;	4.240	0.667	10.1016/j.fbio.2021.100989	Q2	/a

			Ghedini, PC; Diculescu, VC; Gil, ED					
45	Thermal stability of amorphous metal chalcogenide thin films	JOURNAL OF NON-CRYSTALLINE SOLIDS, 559 ,120663 (2021)	Sava, F; Simandan, ID; Stavarache, I; Porosnicu, C; Mihai, C; Velea, A	3.531	0.510	10.1016/j.jnoncrsol.2021.120663	Q1	Q1
46	Niobia-based magnetic nanocomposites: Design and application in direct glucose dehydration to HMF	CATALYSIS TODAY, 366 , pp+48-56 (2021)	Tirsoaga, A; Kuncser, V; Parvulescu, VI; Coman, SM	6.766	1.013	10.1016/j.cattod.2020.09.033	Q1	Q1
47	Enhancing stability of hybrid perovskite solar cells by imidazolium incorporation	SOLAR ENERGY MATERIALS AND SOLAR CELLS, 227 ,111096 (2021)	Tomulescu, AG; Leonat, LN; Neatu, F; Stancu, V; Toma, V; Derbali, S; Neatu, S; Rostas, AM; Besleaga, C; Patru, R; Pintilie, I; Florea, M	7.267	1.128	10.1016/j.solmat.2021.111096	Q1	Q1
48	Conductance zeros in complex molecules and lattices from the interference set method	PHYSICAL REVIEW B, 103 ,125307 (2021)	Nita, M; Tolea, M; Marinescu, DC	4.036	0.976	10.1103/PhysRevB.103.125307	Q2	Q1
49	Tetragonal-Cubic Phase Transition and Low-Field Dielectric Properties of CH ₃ NH ₃ PbI ₃ Crystals	MATERIALS, 14 ,4215 (2021)	Patru, RE; Khassaf, H; Pasuk, I; Botea, M; Trupina, L; Ganea, CP; Pintilie, L; Pintilie, I	3.623	0.595	10.3390/ma14154215	Q1	Q1
50	Physical Vapour Deposited Biomedical Coatings	COATINGS, 11 ,619 (2021)	Stuart, BW; Stan, GE	2.881	0.405	10.3390/coatings11060619	Q2	Q2
51	Preparation of isocyanate-free composite coating with controlled molecular architecture: A new convergent approach to functional macromolecules	PROGRESS IN ORGANIC COATINGS, 151 ,106039 (2021)	Haniffa, MAM; Chee, CY; Illias, HA; Halil, A; Munawer, K; Sandu, V; Chuah, CH	5.161	0.557	10.1016/j.porgcoat.2020.106039	Q1	Q1
52	High-Performance Functionalized Magnetic Nanoparticles with Tailored Sizes and Shapes for Localized Hyperthermia Applications	JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C, 125 , pp+11132-11146 (2021)	Craciunescu, I; Palade, P; Iacob, N; Ispas, GM; Stanciu, AE; Kuncser, V; Turcu, RP	4.126	0.969	10.1021/acs.jpcc.1c01053	Q2	/a
53	Martensitic Transformation and Magnetic Properties of Ni ₅₇ Fe ₁₈ Ga ₂₅ Shape Memory Alloy Subjected to Severe Plastic Deformation	TRANSACTIONS OF THE INDIAN INSTITUTE OF METALS, 74 , pp+2491-2498 (2021)	Popescu, B; Gurau, C; Gurau, G; Tolea, M; Sofronie, M; Tolea, F	1.499	0.178	10.1007/s12666-021-02293-8	Q3	Q2
54	Potassium-containing	JOURNAL OF	Derbali, S; Nouneh, K;	5.316	0.716	10.1016/	Q1	Q1

	triple-cation mixed-halide perovskite materials: Toward efficient and stable solar cells	ALLOYS AND COMPOUNDS, 858 ,158335 (2021)	Florea, M; Leonat, LN; Stancu, V; Tomulescu, AG; Galca, AC; Secu, M; Pintilie, L; Touhami, ME			j.jallcom.2020.158335		
55	Hard/soft effects of multivalence co-dopants in correlation with their location in PZT ceramics	CERAMICS INTERNATIONAL, 47 ,pp+33382-33389 (2021)	Amarande, L; Cioangher, MC; Toma, V; Miclea, CF; Stefan, M; Pasuk, I; Iuga, AR; Negrila, C; Matei, E; Palici, AM; Joita, AC	4.527	0.545	10.1016/j.cerami.2021.08.243	Q1	Q1
56	The Influence of the Ceramic Nanoparticles on the Thermoplastic Polymers Matrix: Their Structural, Optical, and Conductive Properties	POLYMERS, 13 ,2773 (2021)	Smaranda, I; Nila, A; Ganea, P; Daescu, M; Zgura, I; Ciobanu, RC; Trandabat, A; Baibarac, M	4.329	0.597	10.3390/polym13162773	Q1	Q1
57	New superconductor/ferromagnet heterostructure formed by YBa ₂ Cu ₃ O _{7-x} and CaRuO ₃	SUPERCONDUCTOR SCIENCE & TECHNOLOGY, 34 ,115009 (2021)	Ivan, I; Pasuk, I; Crisan, A; Sandu, V; Onea, M; Leca, A; Cosar, C; Burdusel, M	3.219	0.835	10.1088/1361-6668/ac2622	Q2	Q2
58	Design of highly transparent conductive optical coatings optimized for oblique angle light incidence	APPLIED PHYSICS A-MATERIALS SCIENCE & PROCESSING, 127 ,575 (2021)	Nedelcu, N; Chiroiu, V; Munteanu, L; Girip, I; Rugina, C; Lorinczi, A; Matei, E; Sobetkii, A	2.584	0.333	10.1007/s00339-021-04726-z	Q2	Q1
59	Optical, microstructural and vibrational properties of sol-gel ITO films	OPTICAL MATERIALS, 114 ,110999 (2021)	Nicolescu, M; Anastasescu, M; Calderon-Moreno, JM; Maraloiu, AV; Teodorescu, VS; Preda, S; Predoana, L; Zaharescu, M; Gartner, M	3.080	0.424	10.1016/j.optmat.2021.110999	Q2	Q1
60	Fe-N Co-Doped Titanium Dioxide Nanoparticles Induce Cell Death in Human Lung Fibroblasts in a p53-Independent Manner	INTERNATIONAL JOURNAL OF MOLECULAR SCIENCES, 22 ,9627 (2021)	Nica, IC; Stan, MS; Popescu, RG; Nicula, N; Ducu, R; Diamandescu, L; Dinischiotu, A	5.924	1.123	10.3390/ijms22179627	Q1	Q1
61	Influence of Deposition Method on the Structural and Optical Properties of Ge ₂ Sb ₂ Te ₅	MATERIALS, 14 ,3663 (2021)	Simandan, ID; Sava, F; Buruiana, AT; Galca, AC; Becherescu, N; Burducea, I; Mihai, C; Velea, A	3.623	0.595	10.3390/ma14133663	Q1	Q1
62	The Influence of UV Light on Photodegradation of Acetylsalicylic Acid	INTERNATIONAL JOURNAL OF MOLECULAR SCIENCES, 22 ,4046 (2021)	Daescu, M; Iota, M; Serbschi, C; Ion, AC; Baibarac, M	5.924	1.123	10.3390/ijms22084046	Q1	Q1
63	STUDIES ABOUT STRUCTURAL AND	ROMANIAN JOURNAL OF	Cirstea, CD; Lucaci, M; Valeanu, M; Sofronie,	1.888	0.194		Q3	Q4

	THERMAL INVESTIGATIONS ON Ti50Ni30Cu20 ALLOYS OBTAINED BY DIFFERENT TECHNOLOGICAL PROCESSES	PHYSICS, 66 ,601 (2021)	M; Bujoreanu, LG; Lungu, MV; Tsakiris, V; Cucos, A; Talpeanu, D; Enescu, E					
64	Poly(Vinyl Chloride) Spheres Coated with Graphene Oxide Sheets: From Synthesis to Optical Properties and Their Applications as Flame-Retardant Agents	POLYMERS, 13 ,565 (2021)	Baibarac, M; Stingescu, L; Stroe, M; Negrilă, C; Matei, E; Cotet, LC; Anghel, I; Sofran, IE; Baia, L	4.329	0.597	10.3390/polym13040565	Q1	Q1
65	Structural and optical properties of amorphous Si-Ge-Te thin films prepared by combinatorial sputtering	SCIENTIFIC REPORTS, 11 ,11755 (2021)	Mihai, C; Sava, F; Simandan, ID; Galca, AC; Burducea, I; Becherescu, N; Velea, A	4.380	1.285	10.1038/s41598-021-91138-x	Q1	Q1
66	CO adsorption, reduction and oxidation on Pb(Zr,Ti)O-3(001) surfaces associated with negatively charged gold nanoparticles	CATALYSIS TODAY, 366 , pp+141-154 (2021)	Apostol, NG; Husanu, MA; Lizzit, D; Hristea, IA; Chirila, CF; Trupina, L; Teodorescu, CM	6.766	1.013	10.1016/j.cattod.2020.02.042	Q1	Q1
67	CuWO4 with CuO and Cu(OH)(2) Native Surface Layers for H2S Detection under in-Field Conditions	MATERIALS, 14 ,465 (2021)	Somacescu, S; Stanoiu, A; Dinu, IV; Calderon-Moreno, JM; Florea, OG; Florea, M; Osiceanu, P; Simion, CE	3.623	0.595	10.3390/ma14020465	Q1	Q1
68	Sensing Properties of NiO Loaded SnO2 Nanoparticles-Specific Selectivity to H2S	CHEMOSENSORS, 9 ,125 (2021)	Stanoiu, A; Kuncser, AC; Ghica, D; Florea, OG; Somacescu, S; Simion, CE	3.398	0.583	10.3390/chemosensors9060125	Q2	Q4
69	Synthesis and Characterization of Cu2ZnSnS4 Thin Films Obtained by Combined Magnetron Sputtering and Pulsed Laser Deposition	NANOMATERIALS, 11 ,2403 (2021)	Zaki, MY; Sava, F; Buruiana, AT; Simandan, ID; Becherescu, N; Galca, AC; Mihai, C; Velea, A	5.076	0.756	10.3390/nano11092403	Q1	Q1
70	Comparative investigation of structural, EPR, optical and photoluminescence properties of nanostructured LaPO4:Ce/RE/Me and LaPO4:Yb/Er phosphors prepared by co-precipitation method	JOURNAL OF SOLID STATE CHEMISTRY, 301 ,122310 (2021)	AitMellal, O; Oufni, L; Messous, MY; Trandafir, MM; Chirica, IM; Florea, M; Neatu, S; Rostas, AM; Secu, M; Neatu, F	3.498	0.442	10.1016/j.jssc.2021.122310	Q2	Q1
71	The impact of having an oxygen-rich microporous surface in	JOURNAL OF ENERGY CHEMISTRY, 53 ,	Herou, S; Ribadeneyra, MC; Schlee, P; Luo, H; Tanase, LC; Rossberg,	9.676	1.178	10.1016/j.jechem.2020.04	Q1	Q2

	carbon electrodes for high-power aqueous supercapacitors	pp+36-48 (2021)	C; Titirici, M			.068		
72	Structural and Optical Investigations of Ce ³⁺ /Mn ²⁺ -Doped LaPO ₄ Phosphors	JOURNAL OF ELECTRONIC MATERIALS, 50 , pp+2137-2147 (2021)	Aitmellal, O; Oufni, L; Messous, MY; Neatu, F; Florea, M; Neatu, S; Rostas, AM; Secu, M	1.938	0.283	10.1007/s11664-020-08678-7	Q3	Q1
73	Copper(II) species with 1-(o-tolyl)biguanide: Structural characterization, ROS scavenging, antibacterial activity, biocompatibility and in silico studies	APPLIED ORGANOMETALLIC CHEMISTRY, e6471 ()	Maxim, C; Badea, M; Rostas, AM; Chifiriuc, MC; Pircalabioru, GG; Avram, S; Olar, R	4.105	0.422	10.1002/aoc.6471	Q1	Q2
74	Water oxidation at photoanodes based on hematite films and nanowire arrays	THIN SOLID FILMS, 724 ,138626 (2021)	Sima, M; Matei, E; Vasile, E; Sima, A; Preda, N; Logofatu, C	2.183	0.350	10.1016/j.tsf.2021.138626	Q3	Q1
75	Lanthanide doped TiO ₂ : Coexistence of discrete and continuous dopant distribution in anatase phase	JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS, 851 ,156849 (2021)	Avram, D; Patrascu, AA; Istrate, MC; Cojocaru, B; Tiseanu, C	5.316	0.716	10.1016/j.jallcom.2020.156849	Q1	Q1
76	Hybrid Nanostructures Obtained by Transport and Condensation of Tungsten Oxide Vapours onto CNW Templates	NANOMATERIALS, 11 ,835 (2021)	Carpen, LG; Acsente, T; Satulu, V; Matei, E; Vizireanu, S; Bitu, BI; Dinescu, G	5.076	0.756	10.3390/nano11040835	Q1	Q1
77	Magneto-optical properties of borophosphate glasses co-doped with Tb ³⁺ and Dy(3+) ions	JOURNAL OF NON-CRYSTALLINE SOLIDS, 568 ,120967 (2021)	Dinca, MC; Sava, BA; Galca, AC; Kuncser, V; Iacob, N; Stan, GE; Boroica, L; Filip, AV; Elisa, M	3.531	0.510	10.1016/j.jnoncrystsol.2021.120967	Q1	Q1
78	Silicon Metalens Fabrication from Electron Beam to UV-Nanoimprint Lithography	NANOMATERIALS, 11 ,2329 (2021)	Baracu, AM; Avram, MA; Breazu, C; Bunea, MC; Socol, M; Stanculescu, A; Matei, E; Thrane, PCV; Dirdal, CA; Dinescu, A; Rasoga, O	5.076	0.756	10.3390/nano11092329	Q1	Q1
79	Effects of Ge-related storage centers formation in Al ₂ O ₃ enhancing the performance of floating gate memories	APPLIED SURFACE SCIENCE, 542 ,148702 (2021)	Stavarache, I; Cojocaru, O; Maraloiu, VA; Teodorescu, VS; Stoica, T; Ciurea, ML	6.707	0.873	10.1016/j.apsusc.2020.148702	Q1	Q1
80	Hybrid Nanocomposite Platform, Based on Carbon Nanotubes and Poly(Methylene Blue) Redox Polymer Synthesized in Ethaline Deep Eutectic Solvent	SENSORS, 21 ,1161 (2021)	Hosu, O; Barsan, MM; Sandulescu, R; Cristea, C; Brett, CMA	3.576	0.584	10.3390/s21041161	Q1	Q1

	for Electrochemical Determination of 5-Aminosalicylic Acid							
81	Applications of MAX phases and MXenes as catalysts	JOURNAL OF MATERIALS CHEMISTRY A, 9 , pp+19589-19612 (2021)	Chirica, IM; Mirea, AG; Neatu, S; Florea, M; Barsoum, MW; Neatu, F	12.732	2.171	10.1039/d1ta04097a	Q1	Q1
82	Phase and structural characterization of phosphate-tellurite crystalline materials	JOURNAL OF OPTOELECTRONICS AND ADVANCED MATERIALS, 23 , pp+257-263 (2021)	Elisa, M; Vasiliu, IC; Sava, BA; Boroica, L; Filip, AV; Dinca, MC; Bartha, C	0.587	0.063		Q4	Q3
83	Activation ability of Gd dopant in the ZnSe single crystals	JOURNAL OF LUMINESCENCE, 238 , 118314 (2021)	Goncearenco, EP; Rostas, AM; Galca, AC; Colibaba, G; Nedeoglo, DD	3.599	0.438	10.1016/j.jlumin.2021.118314	Q1	Q1
84	Optical, Structural, and Dielectric Properties of Composites Based on Thermoplastic Polymers of the Polyolefin and Polyurethane Type and BaTiO ₃ Nanoparticles	MATERIALS, 14 ,753 (2021)	Baibarac, M; Nila, A; Smaranda, I; Stroe, M; Stingescu, L; Cristea, M; Cercel, RC; Lorinczi, A; Ganea, P; Mercioniu, I; Ciobanu, R; Schreiner, C; Garcia, RG; Bartha, C	3.623	0.595	10.3390/ma14040753	Q1	Q1
85	Operation of a magnetron sputtering gas aggregation cluster source in a plasma jet regime for synthesis of core-shell nanoparticles	JOURNAL OF PHYSICS D-APPLIED PHYSICS, 54 ,02LT01 (2021)	Acsente, T; Istrate, MC; Satulu, V; Bitu, B; Dinescu, G	3.207	0.680	10.1088/1361-6463/abbb05	Q2	Q1
86	Ultrafast nondestructive pyroelectric reading of FeRAM memories	INFRARED PHYSICS & TECHNOLOGY, 116 ,103766 (2021)	Iuga, AR; Lindfors-Vrejoiu, I; Boni, GA	2.638	0.449	10.1016/j.infrared.2021.103766	Q2	Q2
87	Alternative lignopolymer-based composites useful as enhanced functionalized support for enzymes immobilization	CATALYSIS TODAY, 379 , pp+222-229 (2021)	Lite, C; Ion, S; Tudorache, M; Zgura, I; Galca, AC; Enache, M; Maria, GM; Parvulescu, VI	6.766	1.013	10.1016/j.cattod.2020.05.060	Q1	Q1
88	Magnesium-silver cathodes for efficient charge injection into Organic Light Emitting Diodes deposited by LTVA method	JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS, 869 ,159364 (2021)	Vladoiu, R; Mandes, A; Dinca, V; Kudrna, P; Tichy, M; Polosan, S	5.316	0.716	10.1016/j.jallcom.2021.159364	Q1	Q1
89	Multilayer Langmuir-Blodgett thin films studies for chemical sensors development	JOURNAL OF OVONIC RESEARCH, 17 , pp+405-410 (2021)	Baschir, L; Simandan, ID; Sava, F; Mihailescu, A; Socol, G	1.165	0.122		Q4	Q4
90	Transient increase of T _c and J(c) in superconducting/metallc heterostructures	MATERIALS CHEMISTRY AND PHYSICS, 263 ,124390 (2021)	Ionescu, AM; Bihler, M; Simmendinger, J; Miksch, C; Fischer, P; Cristiani, G; Rabinovich, KS; Schutz,	4.094	0.513	10.1016/j.matchemphys.2021.124390	Q2	Q1

			G; Albrecht, J					
91	The Behavior of Gold Metallized AlN/Si- and AlN/Glass-Based SAW Structures as Temperature Sensors	IEEE TRANSACTIONS ON ULTRASONICS FERROELECTRICS AND FREQUENCY CONTROL, 68 , pp+1938-1948 (2021)	Nicoloiu, A; Stan, GE; Nastase, C; Boldeiu, G; Besleaga, C; Dinescu, A; Muller, A	2.725	0.666	10.1109/TUFFC.2020.3037789	Q2	Q1
92	Gold coated electrospun polymeric fibres as new electrode platform for glucose oxidase immobilization	MICROCHEMICAL JOURNAL, 165 , 106108 (2021)	Aldea, A; Leote, RJB; Matei, E; Evanghelidis, A; Enculescu, I; Diculescu, VC	4.821	0.613	10.1016/j.microc.2021.106108	Q1	Q1
93	Effect of ferroelectric poling on the photoelectrochemical activity of hematite-BaTiO ₃ nanowire arrays	INTERNATIONAL JOURNAL OF HYDROGEN ENERGY, 46 , pp+36232-36244 (2021)	Sima, M; Vasile, E; Preda, N; Sima, A; Matei, E; Logofatu, C	5.816	0.684	10.1016/j.ijhydene.2021.08.152	Q2	Q1
94	Nucleobases thin films deposited on nanostructured transparent conductive electrodes for optoelectronic applications	SCIENTIFIC REPORTS, 11 , 7551 (2021)	Breazu, C; Socol, M; Preda, N; Rasoga, O; Costas, A; Socol, G; Petre, G; Stanculescu, A	4.380	1.285	10.1038/s41598-021-87181-3	Q1	Q1
95	The Influence of the Structural and Morphological Properties of WO ₃ Thin Films Obtained by PLD on the Photoelectrochemical Water-Splitting Reaction Efficiency	NANOMATERIALS, 11 , 110 (2021)	Andrei, F; Andrei, A; Birjega, R; Sirjita, EN; Radu, AI; Dinescu, M; Ion, V; Maraloiu, VA; Teodorescu, VS; Scarisoreanu, ND	5.076	0.756	10.3390/nano11010110	Q1	Q1
96	Soft magnetic composites of carbon fibers decorated with magnetite in an epoxy matrix	SOFT MATERIALS, pp+ - ()	Kornilitsina, EV; Lebedeva, EA; Astaf'Eva, SA; Trukhinov, DK; Badica, P	2.429	0.249	10.1080/1539445X.2021.2001527	Q3	Q4
97	Structural, morphological and optical properties of Cu-Fe-Sn-S thin films prepared by electrodeposition at fixed applied potential	THIN SOLID FILMS, 721 , 138547 (2021)	El Khouja, O; Galca, AC; Nouneh, K; Zaki, MY; Touhami, ME; Taibi, M; Matei, E; Negrila, CC; Enculescu, M; Pintilie, L	2.183	0.350	10.1016/j.tsf.2021.138547	Q3	Q1
98	NANOMAGNETIC IRON OXIDE SOLUTION FOR FERTILIZATION ON WHEAT PLANTS	ROMANIAN AGRICULTURAL RESEARCH, 38 , pp+57-67 (2021)	Cimpeanu, C; Badea, ML; Ciobanu, CS; Savulescu, E; Badulescu, L; Petcu, E; Mustatea, P; Raita, SM; Barbuceanu, F; Furnaris, F; Predoi, G	0.500	0.105		Q4	Q4
99	Bandgap atomistic calculations on	SCIENTIFIC REPORTS, 11 , 13582	Cojocar, O; Lepadatu, AM; Nemnes, GA;	4.380	1.285	10.1038/s41598-	Q1	Q1

	hydrogen-passivated GeSi nanocrystals	(2021)	Stoica, T; Ciurea, ML			021-92936-z		
100	Structural, functional properties and enhanced thermal stability of bulk graded (Ba,Sr)TiO ₃ structures obtained by spark plasma sintering	JOURNAL OF MATERIALS RESEARCH AND TECHNOLOGY-JMR&T, 12 , pp+2085-2103 (2021)	Botea, M; Pintilie, I; Surdu, VA; Stanciu, CA; Trusca, RD; Vasile, BS; Patru, R; Ianculescu, AC; Pintilie, L	5.039	0.668	10.1016/j.jmrt.2021.04.011	Q1	Q2
101	Functionalization of basalt fibers with ZnO nanostructures by electroless deposition for improving the interfacial adhesion of basalt fibers/epoxy resin composites	COMPOSITES PART A-APPLIED SCIENCE AND MANUFACTURING, 149 ,106488 (2021)	Preda, N; Costas, A; Lilli, M; Sbardella, F; Scheffler, C; Tirillo, J; Sarasini, F	7.664	1.316	10.1016/j.compositesa.2021.106488	Q1	Q1
102	The Effect of the Deposition Method on the Structural and Optical Properties of ZnS Thin Films	COATINGS, 11 ,1064 (2021)	Simandan, ID; Sava, F; Buruiana, AT; Burducea, I; Becherescu, N; Mihai, C; Velea, A; Galca, AC	2.881	0.405	10.3390/coatings11091064	Q2	Q2
103	Nitrogen Functionalization of CVD Grown Three-Dimensional Graphene Foam for Hydrogen Evolution Reactions in Alkaline Media	MATERIALS, 14 ,4952 (2021)	Ion-Ebrasu, D; Andrei, RD; Enache, S; Caprarescu, S; Negrila, CC; Jianu, C; Enache, A; Boerasu, I; Carcadea, E; Varlam, M; Vasile, BS; Ren, JW	3.623	0.595	10.3390/ma14174952	Q1	Q1
104	Advancements on Basic Working Principles of Photo-Driven Oxidative Degradation of Organic Substrates over Pristine and Noble Metal-Modified TiO ₂ . Model Case of Phenol Photo Oxidation	CATALYSTS, 11 ,487 (2021)	Sandulescu, A; Anastasescu, C; Papa, F; Raciulete, M; Vasile, A; Spataru, T; Scarisoreanu, M; Fleaca, C; Mihailescu, CN; Teodorescu, VS; Spataru, N; Zaharescu, M; Balint, I	4.146	0.655	10.3390/catal11040487	Q2	Q2
105	THE EFFECT OF HYDROXYAPATITE AND IRON OXIDE NANOPARTICLES ON MAIZE AND WINTER WHEAT PLANTS	SCIENTIFIC PAPERS-SERIES A-AGRONOMY, 64 , pp+515-519 (2021)	Petcu, E; Lazar, C; Predoi, D; Cimpeanu, C; Predoi, G; Bartha, S; Vlad, IA; Partal, E	not available	not available		not available	not available
106	Influence of Ce addition and Pt loading upon the catalytic properties of modified mesoporous PtTi-SBA-15 in total oxidation reactions	APPLIED CATALYSIS A-GENERAL, 619 ,118123 (2021)	Ciobanu, M; Petcu, G; Anghel, EM; Papa, F; Apostol, NG; Culita, DC; Atkinson, I; Todorova, S; Shopska, M; Naydenov, A; Velinova, R; Parvulescu, V	5.706	0.934	10.1016/j.apcata.2021.118123	Q1	Q1
107	Soft synthesis and characterization of goethite-based nanocomposites as	RSC ADVANCES, 11 , pp+27589-27602 (2021)	Kuncser, AC; Vlaicu, ID; Pavel, OD; Zavoianu, R; Badea, M; Radu, D; Culita, DC;	3.361	0.525	10.1039/d1ra04211d	Q2	Q1

	promising cyclooctene oxidation catalysts		Rostas, AM; Olar, R					
108	Synthesis and Characterization of Graphite Oxide Derived TiO ₂ -Carbon Composites as Potential Electrocatalyst Supports	TOPICS IN CATALYSIS,, pp+- ()	Ayyubov, I; Borbath, I; Paszti, Z; Sebestyen, Z; Mihaly, J; Szabo, T; Illes, E; Domjan, A; Florea, M; Radu, D; Kuncser, A; Tompos, A; Talas, E	2.910	0.606	10.1007/s11244-021-01513-1	Q2	Q2
109	Properties of Ni _{0.5} Zn _{0.5} Fe ₂ O ₄ nanoparticles with the spinel structure synthesized via cryo-chemical method	APPLIED PHYSICS A-MATERIALS SCIENCE & PROCESSING,127,650 (2021)	Timashkov, I; Shlapa, Y; Maraloiu, VA; Rajnak, M; Timko, M; Belous, A	2.584	0.333	10.1007/s00339-021-04795-0	Q2	Q1
110	Synthesis of titanium nitride via hybrid nanocomposites based on mesoporous TiO ₂ /acrylonitrile	SCIENTIFIC REPORTS,11,5055 (2021)	Locovei, C; Chiriac, AL; Miron, A; Iftimie, S; Antohe, VA; Sarbu, A; Dumitru, A	4.380	1.285	10.1038/s41598-021-84484-3	Q1	Q1
111	Insights about CO Gas-Sensing Mechanism with NiO-Based Gas Sensors-The Influence of Humidity	CHEMOSENSORS,9,244 (2021)	Simion, CE; Ghica, C; Mihalcea, CG; Ghica, D; Mercioniu, I; Somacescu, S; Florea, OG; Stanoiu, A	3.398	0.583	10.3390/chemosensors90244	Q2	Q4
112	Structural, functional properties and enhanced thermal stability of bulk graded (Ba,Sr) TiO ₃ structures obtained by spark plasma sintering (vol 12, pg 2085, 2021)	JOURNAL OF MATERIALS RESEARCH AND TECHNOLOGY-JMR&T,13, pp+1323-1323 (2021)	Botea, M; Pintilie, I; Surdu, VA; Stanciu, CA; Trusca, RD; Vasile, BS; Patru, R; Udrea, M; Ianculescu, AC; Pintilie, L	5.039	0.668	10.1016/j.jmrt.2021.06.001	Q1	Q2
113	New photoactive mesoporous Ce-modified TiO ₂ for simultaneous wastewater treatment and electric power generation	CATALYSIS TODAY,366, pp+164-176 (2021)	Mureseanu, M; Chivu, V; Osiac, M; Ciobanu, M; Bucur, C; Parvulescu, V; Cioatera, N	6.766	1.013	10.1016/j.cattod.2020.09.035	Q1	Q1
114	Structural, morphological and magnetic investigations on cobalt ferrite nanoparticles obtained through green synthesis routes	APPLIED PHYSICS A-MATERIALS SCIENCE & PROCESSING,127,892 (2021)	Gingasu, D; Mindru, I; Culita, DC; Calderon-Moreno, JM; Bartha, C; Greculeasa, S; Iacob, N; Preda, S; Oprea, O	2.584	0.333	10.1007/s00339-021-05044-0	Q2	Q1
115	Carbon Xerogel Nanostructures with Integrated Bi and Fe Components for Hydrogen Peroxide and Heavy Metal Detection	MOLECULES,26,117 (2021)	Fort, CI; Rusu, MM; Cotet, LC; Vulpoi, A; Florea, I; Tuseau-Nenez, S; Baia, M; Baibarac, M; Baia, L	4.412	0.694	10.3390/molecules26010117	Q2	Q1
116	Influences of Dispersions' Shapes and Processing in Magnetic	MATERIALS,14,3696 (2021)	Stancu, V; Galatanu, A; Enculescu, M; Onea, M; Popescu, B; Palade, P;	3.623	0.595	10.3390/ma14133696	Q1	Q1

	Field on Thermal Conductibility of PDMS-Fe3O4 Composites		Aradoaie, M; Ciobanu, R; Pintilie, L					
117	Insight on Ni(II) and Cu(II) complexes of biguanide derivatives developed as effective antimicrobial and antitumour agents	APPLIED ORGANOMETALLIC CHEMISTRY, 35 ,e6155 (2021)	Badea, M; Grecu, MN; Chifiriuc, MC; Bleotu, C; Popa, M; Iorgulescu, EE; Avram, S; Uivarosi, V; Munteanu, AC; Ghica, D; Olar, R	4.105	0.422	10.1002/aoc.6155	Q1	Q2
118	Antiproliferative and antibacterial properties of biocompatible copper(II) complexes bearing chelating N,N-heterocycle ligands and potential mechanisms of action	BIOMETALS, 34 , pp+1155-1172 (2021)	Olar, R; Badea, M; Bacalum, M; Raileanu, M; Ruta, LL; Farcasanu, IC; Rostas, AM; Vlaicu, ID; Popa, M; Chifiriuc, MC	2.949	0.571	10.1007/s10534-021-00334-9	Q3	Q2
119	Experimental and numerical simulation of deposition time effect on ZnS thin films for CZTS-based solar cells	OPTICAL AND QUANTUM ELECTRONICS, 53 ,487 (2021)	Khaaissa, Y; Talbi, A; Nouneh, K; El Khouja, O; Ahmoum, H; Galca, AC; Belahmar, A; Li, GJ; Wang, Q	2.084	0.264	10.1007/s11082-021-03143-z	Q3	Q2
120	Fiber-Templated 3D Calcium-Phosphate Scaffolds for Biomedical Applications: The Role of the Thermal Treatment Ambient on Physico-Chemical Properties	MATERIALS, 14 ,2198 (2021)	Mocanu, AC; Miculescu, F; Stan, GE; Pandele, AM; Pop, MA; Ciocoiu, RC; Voicu, SI; Ciocan, LT	3.623	0.595	10.3390/ma14092198	Q1	Q1
121	Secondary phases and their influence on optical and electrical properties of electrodeposited Cu2FeSnS4 films	APPLIED PHYSICS A-MATERIALS SCIENCE & PROCESSING, 127 ,887 (2021)	El Khouja, O; Galca, AC; Zaki, MY; Talbi, A; Ahmoum, H; Nouneh, K; Touhami, ME; Taibi, M; Matei, E; Enculescu, M; Pintilie, L	2.584	0.333	10.1007/s00339-021-05038-y	Q2	Q1
122	Thermal and Emission Properties of a Series of Lanthanides Complexes with N-Biphenyl-Alkylated-4-Pyridone Ligands: Crystal Structure of a Terbium Complex with N-Benzyl-4-Pyridone	MOLECULES, 26 ,2017 (2021)	Chiriac, FL; Ilis, M; Madalan, A; Manaila-Maximean, D; Secu, M; Circu, V	4.412	0.694	10.3390/molecules26072017	Q2	Q1
123	The Role of Interface Defect States in n- and p-Type Ge Metal-Ferroelectric-Semiconductor Structures with Hf0.5Zr0.5O2	PHYSICA STATUS SOLIDI A-APPLICATIONS AND MATERIALS SCIENCE, 218 ,2000500 (2021)	Boni, GA; Istrate, CM; Zacharaki, C; Tsipas, P; Chaitoglou, S; Evangelou, EK; Dimoulas, A; Pintilie, I; Pintilie, L	1.981	0.381	10.1002/pssa.202000500	Q3	Q1

	Ferroelectric							
124	Bistability of the BiOI complex and its implications on evaluating the "acceptor removal" process in p-type silicon	NUCLEAR INSTRUMENTS & METHODS IN PHYSICS RESEARCH SECTION A-ACCELERATORS SPECTROMETERS DETECTORS AND ASSOCIATED EQUIPMENT, 1017 , 165809 (2021)	Besleaga, C; Kuncser, A; Nutescu, A; Kramberger, G; Moll, M; Pintilie, I	not available	not available	10.1016/j.nima.2021.165809	not available	not available
125	Preliminary Studies on Graphene-Reinforced 3D Products Obtained by the One-Stage Sacrificial Template Method for Bone Reconstruction Applications	JOURNAL OF FUNCTIONAL BIOMATERIALS, 12 , 13 (2021)	Mocanu, AC; Miculescu, F; Stan, GE; Ciocoiu, RC; Corobea, MC; Miculescu, M; Ciocan, LT	not available	not available	10.3390/jfb12010013	not available	not available
126	Comprehensive analysis of compatible natural fibre as sacrificial porogen template for tailored ceramic 3D bioproducts destined for hard tissue reconstruction	CERAMICS INTERNATIONAL, 47 , pp+5318-5334 (2021)	Mocanu, AC; Miculescu, F; Miculescu, M; Ciocoiu, RC; Pandele, AM; Stan, GE; Cimpean, A; Voicu, SI; Ciocan, LT	4.527	0.545	10.1016/j.ceramint.2020.10.113	Q1	Q1
127	Laser synthesis of Ni(x)ZnyO/reduced graphene oxide/carbon nanotube electrodes for energy storage applications	APPLIED SURFACE SCIENCE, 563 , 150234 (2021)	Lebiere, PG; del Pino, AP; Logofatu, C; Gyorgy, E	6.707	0.873	10.1016/j.apsusc.2021.150234	Q1	Q1
128	Peculiarities of the structural and optical properties of rare-earth-doped phosphate glasses for temperature sensing applications	JOURNAL OF NON-CRYSTALLINE SOLIDS, 556 , 120569 (2021)	Elisa, M; Iordache, SM; Iordache, AM; Vasiliu, IC; Grigorescu, CEA; Sava, BA; Boroica, L; Filip, AV; Dinca, MC; Bartha, C; de Acha, N; Aguado, CE	3.531	0.510	10.1016/j.jnoncrsol.2020.120569	Q1	Q1
129	Role of Ln type in the physical mechanisms of defect mediated luminescence of Li, Ln-SnO2 nanoparticles	JOURNAL OF MATERIALS CHEMISTRY C, 9 , pp+148-157 (2021)	Cojocar, B; Colbea, C; Avram, D; Istrate, C; Abramiuc, L; Tiseanu, C	7.393	1.253	10.1039/d0tc04582a	Q1	Q1
130	Ecological formulation for improving resveratrol stability and release in aqueous environment	CHEMICAL PAPERS, 75 , pp+2033-2041 (2021)	Todan, L; Voicescu, M; Culita, DC; Pandele-Cusu, J; Albu, C; Kuncser, AC	2.097	0.243	10.1007/s11696-020-01409-6	Q3	Q2
131	A nanoscale continuous transition from the monoclinic to ferroelectric	JOURNAL OF MATERIALS CHEMISTRY C, 9 , pp+12353-12366 (2021)	Palade, C; Lepadatu, AM; Slav, A; Cojocar, O; Iuga, A; Maraloiu, VA; Moldovan, A;	7.393	1.253	10.1039/d1tc02921e	Q1	Q1

	orthorhombic phase inside HfO ₂ nanocrystals stabilized by HfO ₂ capping and self-controlled Ge doping		Dinescu, M; Teodorescu, VS; Stoica, T; Ciurea, ML					
132	Morpho-structural properties of ZnSe, TiO ₂ -ZnSe materials and enzymatic activity of their bioinorganic hybrids with lysozyme	MATERIALS SCIENCE AND ENGINEERING B-ADVANCED FUNCTIONAL SOLID-STATE MATERIALS, 272 , 1153-1155 (2021)	Anastasescu, C; Gifu, IC; Negrilă, C; Socoteanu, R; Atkinson, I; Calderon-Moreno, JM; Munteanu, C; Plavan, G; Strungaru, SA; Cheatham, B; Malaroiu, AV; Teodorescu, VS; Anastasescu, M; Zaharescu, M; Balint, I; Lazarescu, V	4.051	0.646	10.1016/j.mseb.2021.115350	Q2	Q1
133	The effects of mechanical alloying on the physical and thermal properties of CuCrFeTiV alloy	MATERIALS SCIENCE AND ENGINEERING B-ADVANCED FUNCTIONAL SOLID-STATE MATERIALS, 263 , 1148-1150 (2021)	Antao, F; Dias, M; Correia, JB; Galatanu, A; Galatanu, M; Mardolcar, UV; Myakush, A; Cruz, MM; Casaca, A; da Silva, RC; Alves, E	4.051	0.646	10.1016/j.mseb.2020.114805	Q2	Q1
134	The Effect of the In-Situ Heat Treatment on the Martensitic Transformation and Specific Properties of the Fe-Mn-Si-Cr Shape Memory Alloys Processed by HSHPT Severe Plastic Deformation	MATERIALS, 14 , 4621 (2021)	Gurau, C; Gurau, G; Tolea, F; Popescu, B; Banu, M; Bujoreanu, LG	3.623	0.595	10.3390/ma14164621	Q1	Q1
135	Development of Iron-Doped Hydroxyapatite Coatings	COATINGS, 11 , 186 (2021)	Predoi, D; Iconaru, SL; Ciobanu, SC; Predoi, SA; Buton, N; Megier, C; Beuran, M	2.881	0.405	10.3390/coatings11020186	Q2	Q2
136	Carbon-Coated SiO ₂ Composites as Promising Anode Material for Li-Ion Batteries	MOLECULES, 26 , 4531 (2021)	Buga, MR; Spinu-Zaulet, AA; Ungureanu, CG; Mitran, RA; Vasile, E; Florea, M; Neatu, F	4.412	0.694	10.3390/molecules26154531	Q2	Q1
137	pH-triggered intracellular release of doxorubicin by a poly(glycidyl methacrylate)-based double-shell magnetic nanocarrier	MATERIALS SCIENCE & ENGINEERING C-MATERIALS FOR BIOLOGICAL APPLICATIONS, 118 , 11498 (2021)	Zohreh, N; Rastegaran, Z; Hosseini, SH; Akhlaghi, M; Istrate, C; Busuioc, C	7.328	0.899	10.1016/j.msec.2020.111498	Q1	Q1
138	Semiconductor/relaxor 0-3 type composites: A novel strategy for	JOURNAL OF SCIENCE-ADVANCED	Jayakrishnan, AR; Silva, JPB; Kamakshi, K; Annapureddy, V;	5.469	0.730	10.1016/j.jsamd.2020.09.	Q2	Q3

	energy storage capacitors	MATERIALS AND DEVICES, 6 , pp+19-26 (2021)	Mercioniu, IF; Sekhar, KC			012		
139	Pyrolysis and combustion of polystyrene composites based on graphene oxide functionalized with 3-(methacryloyloxy)-propyltrimethoxysilane	JOURNAL OF POLYMER ENGINEERING, 41 , pp+615-626 (2021)	Anghel, I; Lisa, G; Sofran, IE; Mitroi-Symeonidis, FC; Rusu, MM; Baia, M; Baia, L; Magyari, K; Danciu, V; Cotet, LC; Stroe, M; Baibarac, M	1.367	0.178	10.1515/polyeng-2021-0071	Q4	Q4
140	Biocompatible Silver Nanoparticles: Study of the Chemical and Molecular Structure, and the Ability to Interact with Cadmium and Arsenic in Water and Biological Properties	NANOMATERIALS, 11 , 2540 (2021)	Bertela, F; Marsotto, M; Meneghini, C; Burratti, L; Maraloiu, VA; Iucci, G; Venditti, I; Proposito, P; D'Ezio, V; Persichini, T; Battocchio, C	5.076	0.756	10.3390/nano11102540	Q1	Q1
141	Phosphate bioglass thin-films: Cross-area uniformity, structure and biological performance tailored by the simple modification of magnetron sputtering gas pressure	APPLIED SURFACE SCIENCE, 541 , 148640 (2021)	Tite, T; Popa, AC; Chirica, IM; Stuart, BW; Galca, AC; Balescu, LM; Popescu-Pelin, G; Grant, DM; Ferreira, JMF; Stan, GE	6.707	0.873	10.1016/j.apsusc.2020.148640	Q1	Q1
142	Laser fabrication of hybrid electrodes composed of nanocarbons mixed with cerium and manganese oxides for supercapacitive energy storage	JOURNAL OF MATERIALS CHEMISTRY A, 9 , pp+1192-1206 (2021)	Lebiere, PG; del Pino, AP; Domingo, GD; Logofatu, C; Martinez-Rovira, I; Yousef, I; Gyorgy, E	12.732	2.171	10.1039/d0ta06756c	Q1	Q1
143	Chemical Degradation of Methylene Blue Dye Using TiO ₂ /Au Nanoparticles	NANOMATERIALS, 11 , 1605 (2021)	Jinga, LI; Popescu-Pelin, G; Socol, G; Mocanu, S; Tudose, M; Culita, DC; Kuncser, A; Ionita, P	5.076	0.756	10.3390/nano11061605	Q1	Q1
144	Investigation of Opto-Electronic Properties and Stability of Mixed-Cation Mixed-Halide Perovskite Materials with Machine-Learning Implementation	ENERGIES, 14 , 5431 (2021)	Filipoiu, N; Mitran, TL; Anghel, DV; Florea, M; Pintilie, I; Manolescu, A; Nemnes, GA	3.004	0.444	10.3390/en14175431	Q3	Q1
145	Preparation and Characterization of Dextran Coated Iron Oxide Nanoparticles Thin Layers	POLYMERS, 13 , 2351 (2021)	Predoi, G; Ciobanu, CS; Iconaru, SL; Predoi, D; Dregheici, DB; Groza, A; Barbuceanu, F; Cimpeanu, C; Badea, ML; Barbuceanu, SF; Furnaris, CF; Belu, C; Ghegoiu, L; Raita, MS	4.329	0.597	10.3390/polym13142351	Q1	Q1

146	Recent progress in electrocatalysts and electrodes for portable fuel cells	JOURNAL OF MATERIALS CHEMISTRY A, 9 , pp+17065-17128 (2021)	Neatu, S; Neatu, F; Chirica, IM; Borbath, I; Talas, E; Tompos, A; Somacescu, S; Osiceanu, P; Folgado, MA; Chaparro, AM; Florea, M	12.732	2.171	10.1039/d1ta03644k	Q1	Q1
147	THERMAL BEHAVIOR OF Cu-DOPED TiO2 GELS SYNTHESIZED BY THE SOL-GEL METHOD	REVUE ROUMAINE DE CHIMIE, 66 , pp+219-229 (2021)	Pandele-Cusu, J; Atkinson, I; Rusu, A; Apostol, N; Teodorescu, V; Predoana, L; Szilagyi, IM; Pokol, G; Zaharescu, M	0.278	0.047	10.33224/rch.2021.66.3.01	Q4	Q4
148	Mesoporous TiO2 from Metal-Organic Frameworks for Photoluminescence-Based Optical Sensing of Oxygen	CATALYSTS, 11 ,795 (2021)	Alfe, M; Gargiulo, V; Amati, M; Maraloiu, VA; Maddalena, P; Lettieri, S	4.146	0.655	10.3390/catal11070795	Q2	Q2
149	Thickness-Dependent Photoelectrochemical Water Splitting Properties of Self-Assembled Nanostructured LaFeO3 Perovskite Thin Films	NANOMATERIALS, 11 ,1371 (2021)	Andrei, F; Ion, V; Birjega, R; Dinescu, M; Enea, N; Pantelica, D; Mihai, MD; Maraloiu, VA; Teodorescu, VS; Marcu, IC; Scarisoreanu, ND	5.076	0.756	10.3390/nano11061371	Q1	Q1
150	Boost of Charge Storage Performance of Graphene Nanowall Electrodes by Laser-Induced Crystallization of Metal Oxide Nanostructures	ACS APPLIED MATERIALS & INTERFACES, 13 , pp+17957-17970 (2021)	Esqueda-Barron, Y; del Pino, AP; Lebiere, PG; Musheghyan-Avetisyan, A; Bertran-Serra, E; Gyorgy, E; Logofatu, C	9.229	1.697	10.1021/acsami.1c00951	Q1	Q1
151	Benzofurazan derivatives modified graphene oxide nanocomposite: Physico-chemical characterization and interaction with bacterial and tumoral cells	MATERIALS SCIENCE & ENGINEERING C-MATERIALS FOR BIOLOGICAL APPLICATIONS, 123 ,112028 (2021)	Tudose, M; Anghel, EM; Hristea, EN; Voicescu, M; Somacescu, S; Culita, DC; Musuc, AM; Dumitrascu, F; Hanganu, A; Kuncser, A; Zorila, FL; Alexandru, M; Acasandrei, MA; Savu, DI	7.328	0.899	10.1016/j.msec.2021.112028	Q1	Q1
152	One-pot strategy for obtaining magnetic PMMA particles through ATRP using Fe(CO)(5) as co-initiator	EUROPEAN POLYMER JOURNAL, 152 ,110446 (2021)	Diacon, A; Rusen, E; Rizea, F; Ghebaur, A; Berger, D; Somoghi, R; Matei, A; Palade, P; Tutunaru, O	4.598	0.664	10.1016/j.eurpolymj.2021.110446	Q1	Q1
153	A novel composite based on pyrene thiazole grafted on graphene oxide: physico-chemical characterization and	MATERIALS CHEMISTRY AND PHYSICS, 262 ,124315 (2021)	Tudose, M; Baratoi-Carpen, RD; Anghel, EM; Voicescu, M; Somacescu, S; Culita, DC; Hanganu, A;	4.094	0.513	10.1016/j.matchemphys.2021.124315	Q2	Q1

	electrochemical investigations		Kuncser, A; Radoi, A					
154	Sintered and 3D-Printed Bulks of MgB ₂ -Based Materials with Antimicrobial Properties	MOLECULES, 26 ,6045 (2021)	Badica, P; Batalu, ND; Chifiriuc, MC; Burdusel, M; Grigoroscuta, MA; Aldica, GV; Pasuk, I; Kuncser, A; Popa, M; Agostino, A; Operti, L; Padhi, SK; Bonino, V; Truccato, M	4.412	0.694	10.3390/molecules26196045	Q2	Q1
155	Valorization of Gleditsia triacanthos Invasive Plant Cellulose Microfibers and Phenolic Compounds for Obtaining Multi-Functional Wound Dressings with Antimicrobial and Antioxidant Properties	INTERNATIONAL JOURNAL OF MOLECULAR SCIENCES, 22 ,33 (2021)	Marinas, IC; Oprea, E; Geana, EI; Tutunaru, O; Pircalabioru, GG; Zgura, I; Chifiriuc, MC	5.924	1.123	10.3390/ijms22010033	Q1	Q1
156	From useless humins by-product to Nb@graphite-like carbon catalysts highly efficient in HMF synthesis	APPLIED CATALYSIS A-GENERAL, 618 ,118130 (2021)	El Fergani, M; Candu, N; Tudorache, M; Bucur, C; Djelal, N; Granger, P; Coman, SM	5.706	0.934	10.1016/j.apcata.2021.118130	Q1	Q1
157	Kaolin clay pottery discovered in the Roman city of Romula (Olt County, Romania)	JOURNAL OF ARCHAEOLOGICAL SCIENCE-REPORTS, 36 ,102899 (2021)	Badica, P; Alexandru-Dinu, A; Grigoroscuta, M; Locovei, C; Kuncser, A; Bartha, C; Aldica, G; Negru, M; Batalu, D; Cruceru, N; Savulescu, I	not available	not available	10.1016/j.jasrep.2021.102899	not available	not available
158	Effect of strain and stoichiometry on the ferroelectric and pyroelectric properties of the epitaxial Pb(Zr _{0.2} Ti _{0.8})O ₃ films deposited on Si wafers	MATERIALS SCIENCE AND ENGINEERING B-ADVANCED FUNCTIONAL SOLID-STATE MATERIALS, 266 ,115042 (2021)	Chirila, C; Boni, GA; Filip, LD; Husanu, M; Neatu, S; Istrate, CM; Le Rhun, G; Vilquin, B; Trupina, L; Pasuk, I; Botea, M; Pintilie, I; Pintilie, L	4.051	0.646	10.1016/j.mseb.2021.115042	Q2	Q1
159	NiO/Sr doped Ce(0.85)Pr _{0.10} Er _{0.05} O(2- δ) mesoarchitected catalyst for partial oxidation of CH ₄ and anode fueled by H ₂	MICROPOROUS AND MESOPOROUS MATERIALS, 323 ,111171 (2021)	Navarrete, L; Florea, M; Osiceanu, P; Calderon-Moreno, JM; Trandafir, MM; Somacescu, S; Serra, JM	5.455	0.729	10.1016/j.micromeso.2021.111171	Q1	Q1
160	Engineering hydrogenation active sites on graphene oxide and N-doped graphene by plasma treatment	APPLIED CATALYSIS B-ENVIRONMENTAL, 287 ,119962 (2021)	Magureanu, M; Mandache, NB; Rizescu, C; Bucur, C; Cojocaru, B; Man, IC; Primo, A; Parvulescu, VI; Garcia, H	19.503	2.657	10.1016/j.apcatb.2021.119962	Q1	Q1

161	Thermoelectric Efficiency of Epitaxial GeSn Alloys for Integrated Si-Based Applications: Assessing the Lattice Thermal Conductivity by Raman Thermometry	ACS APPLIED ENERGY MATERIALS, 4 , pp+7385-7392 (2021)	Spirito, D; Driesch, NV; Manganelli, CL; Zoellner, MH; Corley-Wiciak, AA; Ikonic, Z; Stoica, T; Grutzmacher, D; Buca, D; Capellini, G	6.024	1.215	10.1021/acsam.1c01576	Q2	Q1
162	The Physico-Chemical Properties and Exploratory Real-Time Cell Analysis of Hydroxyapatite Nanopowders Substituted with Ce, Mg, Sr, and Zn (0.5-5 at.%)	MATERIALS, 14 ,3808 (2021)	Chirica, IM; Enciu, AM; Tite, T; Dudau, M; Albulescu, L; Iconaru, SL; Predoi, D; Pasuk, I; Enculescu, M; Radu, C; Mihalcea, CG; Popa, AC; Rusu, N; Nita, S; Tanase, C; Stan, GE	3.623	0.595	10.3390/ma14143808	Q1	Q1
163	Antibacterial composite coatings of MgB2 powders embedded in PVP matrix	SCIENTIFIC REPORTS, 11 ,9591 (2021)	Badica, P; Batalu, ND; Burdusel, M; Grigoroscutea, MA; Aldica, G; Enculescu, M; Pircalabioru, GG; Popa, M; Marutescu, LG; Dumitriu, BG; Olariu, L; Bicu, A; Purcareanu, B; Opeti, L; Bonino, V; Agostino, A; Truccato, M; Chifiriuc, MC	4.380	1.285	10.1038/s41598-021-88885-2	Q1	Q1
164	Self-induction and magnetic effects in electron transport through a photon cavity	PHYSICAL E-LOW-DIMENSIONAL SYSTEMS & NANOSTRUCTURES, 127 ,114544 (2021)	Gudmundsson, V; Abdullah, NR; Tang, CS; Manolescu, A; Moldoveanu, V	3.382	0.474	10.1016/j.physe.2020.114544	Q2	Q2
165	Cyclophane with eclipsed pyrene units enables construction of spin interfaces with chemical accuracy	CHEMICAL SCIENCE, 12 , pp+8430-8437 (2021)	Metzelaars, M; Schleicher, S; Hattori, T; Borca, B; Matthes, F; Sanz, S; Burgler, DE; Rawson, J; Schneider, CM; Kogerler, P	9.825	2.499	10.1039/d1sc01036k	Q1	Q1
166	TiO2 nanoparticles coated with bio-inspired ligands for the safer-by-design development of photocatalytic paints	ENVIRONMENTAL SCIENCE-NANO, 8 , pp+297-310 (2021)	Laisney, J; Rosset, A; Bartolomei, V; Predoi, D; Truffier-Boutry, D; Artous, S; Berge, V; Brochard, G; Michaud-Soret, I	8.131	1.427	10.1039/d0en00947d	Q1	Q1
167	Nd-doped ZnO films grown on c-cut sapphire by pulsed-electron beam deposition under oblique incidence	APPLIED SURFACE SCIENCE, 563 ,150287 (2021)	Nistor, M; Millon, E; Cachoncinlle, C; Ghica, C; Hebert, C; Perriere, J	6.707	0.873	10.1016/j.apsusc.2021.150287	Q1	Q1
168	All-Oxide p-n Junction Thermoelectric Generator Based on SnOx and ZnO Thin	ACS APPLIED MATERIALS & INTERFACES, 13 , pp+35187-35196 (2021)	Vieira, EMF; Silva, JPB; Veltruska, K; Istrate, CM; Lenzi, V; Trifiletti, V; Lorenzi, B;	9.229	1.697	10.1021/acsami.1c09748	Q1	Q1

	Films		Matolin, V; Ghica, C; Marques, L; Fenwick, O; Goncalves, LM					
169	Antimicrobial Activity of MgB2 Powders Produced via Reactive Liquid Infiltration Method	MOLECULES,26,4966 (2021)	Padhi, SK; Baglieri, N; Bonino, V; Agostino, A; Operti, L; Batalu, ND; Chifiriuc, MC; Popa, M; Burdusel, M; Grigoroscuta, MA; Aldica, GV; Radu, D; Badica, P; Truccato, M	4.412	0.694	10.3390/molecules26164966	Q2	Q1
170	Temperature and thickness dependent magnetostatic properties of [Fe/Py]/FeMn/Py multilayers	LOW TEMPERATURE PHYSICS,47, pp+483-487 (2021)	Polishchuk, DM; Nakonechna, OI; Lytvynenko, YM; Kuncser, V; Savina, YO; Pashchenko, VO; Kravets, AF; Tovstolytkin, AI; Korenivski, V	0.923	0.191	10.1063/10.0004971	Q4	Q3
171	BIOPHYSICAL ASPECTS OF BIO-NANOSILVER GENERATED FROM URTICA DIOICA LEAVES AND VITIS VINIFERA FRUITS' EXTRACTS	ROMANIAN REPORTS IN PHYSICS,73,601 (2021)	Barbinta-Patrascu, ME; Nichita, C; Badea, N; Ungureanu, C; Bacalum, M; Zgura, I; Iosif, L; Antohe, S	1.785	0.268		Q3	Q4
172	Impact of Iridium Oxide Electrodes on the Ferroelectric Phase of Thin Hf0.5Zr0.5O2 Films	PHYSICA STATUS SOLIDI-RAPID RESEARCH LETTERS,15,2100012 (2021)	Mittmann, T; Szyjka, T; Alex, H; Istrate, MC; Lomenzo, PD; Baumgarten, L; Muller, M; Jones, JL; Pintilie, L; Mikolajick, T; Schroeder, U	2.821	0.695	10.1002/pssr.202100012	Q2	Q2
173	MgB2 powders and bioevaluation of their interaction with planktonic microbes, biofilms, and tumor cells	JOURNAL OF MATERIALS RESEARCH AND TECHNOLOGY-JMR&T,12, pp+2168-2184 (2021)	Badica, P; Batalu, ND; Chifiriuc, MC; Burdusel, M; Grigoroscuta, MA; Aldica, G; Pasuk, I; Kuncser, A; Enculescu, M; Popa, M; Marutescu, LG; Gheorghe, I; Thamer, O; Bleotu, C; Pircalabioru, GG; Operti, L; Bonino, V; Agostino, A; Truccato, M	5.039	0.668	10.1016/j.jmrt.2021.04.003	Q1	Q2
174	Beyond Nitrogen in the Oxygen Reduction Reaction on Nitrogen-Doped Carbons: A NEXAFS Investigation	NANOMATERIALS,11,1198 (2021)	Tanasa, E; Maxim, FI; Emniyazov, T; Iacob, MT; Skala, T; Tanase, LC; Ianasi, C; Moisesescu, C; Miron, C; Ardelean, I; Antohe, VA; Fagadar-Cosma, E; Stamatin, SN	5.076	0.756	10.3390/nano11051198	Q1	Q1

175	Composite Drug Delivery System Based on Amorphous Calcium Phosphate-Chitosan: An Efficient Antimicrobial Platform for Extended Release of Tetracycline	PHARMACEUTICS, 13 , 1659 (2021)	Visan, AI; Ristoscu, C; Popescu-Pelin, G; Sopronyi, M; Matei, CE; Socol, G; Chifiriuc, MC; Bleotu, C; Grossin, D; Brouillet, F; Le Grill, S; Bertrand, G; Zgura, I; Cristescu, R; Mihailescu, IN	6.321	0.903	10.3390/pharmaceutics13101659	Q1	Q1
176	Role of vanadium oxide on the lithium silicate glass structure and properties	JOURNAL OF THE AMERICAN CERAMIC SOCIETY, 104 , pp+2495-2505 (2021)	Gaddam, A; Allu, AR; Fernandes, HR; Stan, GE; Negrila, CC; Jamale, AP; Mear, FO; Montagne, L; Ferreira, JMF	3.784	0.676	10.1111/jace.17671	Q1	Q1
177	Effect of Vanadium Oxide on the Structure and Li-Ion Conductivity of Lithium Silicate Glasses	JOURNAL OF PHYSICAL CHEMISTRY C, 125 , pp+16843-16857 (2021)	Gaddam, A; Allu, AR; Ganiseti, S; Fernandes, HR; Stan, GE; Negrila, CC; Jamale, AP; Mear, F; Montagne, L; Ferreira, JMF	4.126	0.969	10.1021/acs.jpcc.1c05059	Q2	/a
178	In Vitro Evaluation of MgB2 Powders as Novel Tools to Fight Fungal Biodeterioration of Heritage Buildings and Objects	FRONTIERS IN MATERIALS, 7 , 601059 (2021)	Gheorghe, I; Avram, I; Corbu, VM; Marutescu, L; Popa, M; Balotesu, I; Blajan, I; Mateescu, V; Zaharia, D; Dumbrava, AS; Zetu, OE; Pecete, I; Cristea, VC; Batalu, D; Grigoroscutea, MA; Burdusel, M; Aldica, GV; Badica, P; Datcu, AD; Ianovici, N; Bleotu, C; Lazar, V; Ditu, LM; Chifiriuc, MC	3.515	0.658	10.3389/fmats.2020.601059	Q2	Q2
179	Preparation of Porous Hydroxyapatite Using Cetyl Trimethyl Ammonium Bromide as Surfactant for the Removal of Lead Ions from Aquatic Solutions	POLYMERS, 13 , 1617 (2021)	Predoi, SA; Ciobanu, CS; Motelica-Heino, M; Chifiriuc, MC; Badea, ML; Iconaru, SL	4.329	0.597	10.3390/polym13101617	Q1	Q1
180	Investigation of Spin Coating Cerium-Doped Hydroxyapatite Thin Films with Antifungal Properties	COATINGS, 11 , 464 (2021)	Iconaru, SL; Predoi, MV; Chapon, P; Gaiaschi, S; Rokosz, K; Raaen, S; Motelica-Heino, M; Predoi, D	2.881	0.405	10.3390/coatings11040464	Q2	Q2
181	Preliminary Study on Light-Activated Antimicrobial Agents as Photocatalytic Method for Protection of Surfaces with Increased Risk of Infections	MATERIALS, 14 , 5307 (2021)	Bucuresteanu, R; Ditu, LM; Ionita, M; Calinescu, I; Raditoiu, V; Cojocaru, B; Cinteza, LO; Curutiu, C; Holban, AM; Enachescu, M; Enache, LB; Mustatea, G; Chihaia, V;	3.623	0.595	10.3390/ma14185307	Q1	Q1

			Nicolaev, A; Borcan, EL; Mihaescu, G					
182	Wake-up Free Ferroelectric Rhombohedral Phase in Epitaxially Strained ZrO ₂ Thin Films	ACS APPLIED MATERIALS & INTERFACES, 13 , pp+51383-51392 (2021)	Silva, JPB; Negrea, RF; Istrate, MC; Dutta, S; Aramberri, H; Iniguez, J; Figueiras, FG; Ghica, C; Sekhar, KC; Kholkin, AL	9.229	1.697	10.1021/acsami.1c15875	Q1	Q1
183	Multi-Level Evaluation of UV Action upon Vitamin D Enhanced, Silver Doped Hydroxyapatite Thin Films Deposited on Titanium Substrate	COATINGS, 11 ,120 (2021)	Negrila, CC; Predoi, D; Ghita, RV; Iconaru, SL; Ciobanu, SC; Manea, M; Badea, ML; Costescu, A; Trusca, R; Predoi, G; Stanciu, GA; Hristu, R; Dragu, LD; Bleotu, C; Groza, A; Marinas, IC; Chifiriuc, MC	2.881	0.405	10.3390/coatings11020120	Q2	Q2
184	Band-Order Anomaly at the gamma-Al ₂ O ₃ /SrTiO ₃ Interface Drives the Electron-Mobility Boost	ACS NANO, 15 , pp+4347-4356 (2021)	Chikina, A; Christensen, DV; Borisov, V; Husanu, MA; Chen, YZ; Wang, XQ; Schmitt, T; Radovic, M; Nagaosa, N; Mishchenko, AS; Valenti, R; Pryds, N; Strocov, VN	15.881	3.681	10.1021/acsnano.0c07609	Q1	Q1
185	Physicochemical Characterization and Drug Release Properties of Methyl-Substituted Silica Xerogels Made Using Sol-Gel Process	INTERNATIONAL JOURNAL OF MOLECULAR SCIENCES, 22 ,9197 (2021)	Len, A; Paladini, G; Romanszki, L; Putz, AM; Almasy, L; Laszlo, K; Balint, S; Krajnc, A; Kriechbaum, M; Kuncser, A; Kalmar, J; Dudas, Z	5.924	1.123	10.3390/ijms22179197	Q1	Q1
186	Structural features, magnetic and ferroelectric properties of SrFe _{10.8} In _{1.2} O ₁₉ compound	MATERIALS RESEARCH BULLETIN, 138 ,111236 (2021)	Turchenko, V; Kostishin, VG; Trukhanov, S; Damay, F; Balasoiu, M; Bozzo, B; Fina, I; Burkhovetsky, VV; Polosan, S; Zdorovets, MV; Kozlovskiy, AL; Astapovich, KA; Trukhanov, A	4.641	0.504	10.1016/j.matresbull.2021.111236	Q2	Q1
187	The origin of the dual ferroic properties in quasi-centrosymmetrical SrFe _{12-x} In _x O ₁₉ hexaferrites	JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS, 886 ,161249 (2021)	Trukhanov, AV; Turchenko, VA; Kostishin, VG; Damay, F; Porcher, F; Lupu, N; Bozzo, B; Fina, I; Polosan, S; Silibin, MV; Salem, MM; Tishkevich, DI; Trukhanov, SV	5.316	0.716	10.1016/j.jallcom.2021.161249	Q1	Q1

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

Nr. crt.	Titlul articolului, Manifestarea științifică, Volumul, Pagina nr.	Nume Autor(i)	An apariție	Nr. citări ISI	Tip prezentare
1	<i>Ferroelectric based multilayered thin films structures for multi-bit memory and memcomputing</i> , Materials Challenges for Memory Conference, sponsored by APL Materials, conferință desfășurată online, 11–13 aprilie.	A.G. Boni, C. Chirila, L.D. Filip, I. Pasuk, L. Hrib, L. Trupina, I. Pintilie, L. Pintilie	2021	n/a	Poster
2	<i>The study of polarization switching and negative capacitance regime in epitaxial ferroelectric thin films structures</i> , IEEE ISAF 2021, conferința desfășurată online, 16 – 21 mai.	A.G. Boni, L.D. Filip, C.F. Chirila, I. Pintilie, L. Pintilie	2021	n/a	Poster
3	<i>Bi-phasic calcium phosphate implant coatings fabricated by pulsed laser deposition of natural origin</i> , E-MRS 2021 Spring Meeting, Secțiunea: Functional Ceramics, Thin Films and Crystalline Materials, conferința desfășurată online, 21 mai – 3 iunie.	G. Popescu-Pelin, C. Ristoscu, L. Duta, I. Pasuk, G.E. Stan, M.S. Stan, M. Popa, M.C. Chifiriuc, C. Hapenciuc, F.N. Oktar, A. Nicarel, I.N. Mihailescu	2021	n/a	Poster
4	<i>Tuning the cross-area uniformity, structure and biological response of sputtered phosphate bioglass films by the gas pressure</i> , E-MRS 2021 Fall Meeting, Secțiunea „Materials and technological solutions preventing biofilms and antimicrobial resistance”, conferință desfășurată online, 20–23 septembrie.	T. Tite, A.C. Popa, I.M. Chirica, B.W. Stuart, A.C. Galca, L.M. Balescu, G. Popescu-Pelin, D.M. Grant, J.M.F. Ferreira, G.E. Stan	2021	n/a	Poster
5	<i>Synthesis of vanadium oxide/graphene thin films by physical vapor deposition method for high performance batteries</i> , E-MRS 2021 Fall Meeting, Secțiunea „Battery and energy storage devices: from materials to eco-design”, conferință desfășurată online, 20–23 septembrie.	T. Tite, M. Buga, C. Ungureanu, A.A. Zaulet, I. Stavarache, E. Matei, G.E. Stan, C.C. Negri, A.C. Galca, M.C. Bartha, M. Baibarac	2021	n/a	Poster
6	<i>Ferroelectric-induced charge modulation at multiferroic interfaces</i> , International Conference on Strongly Correlated Electron Systems, September 27 – October 2, 2021, Brazil, online, Vol 1 2021 – https://proceedings.science/sces-2020 ; https://proceedings.science/p/132558	D. G. Popescu, M. A. Husanu, L. Hrib, V. Strocov	2021	n/a	Plenary
7	<i>Rhombohedral distortion in the electronic band structure of strained PbZrTiO₃</i> , International Conference on Strongly Correlated Electron Systems, September 27 – October 2, 2021, Brazil, online, Vol 1 2021 -	M. A. Husanu, D. G. Popescu, L. Hrib, L. Pintilie, V. Strocov	2021	n/a	Poster

	https://proceedings.science/sces-2020 ; https://proceedings.science/p/132584				
8	<i>Electronic and Structural States of Al:SrTiO₃ Photocatalyst for Water-Splitting</i> , The 23 rd International Conference “New Cryogenic and Isotope Technologies for Energy and Environment” EnergyEn 2021, October 26–29, 2021, Băile Govora, Romania, online, https://www.icsi.ro/wp-content/uploads/2021/10/PROCEEDING-EnergEn-2021-1.pdf p. 39	M. A. Husanu, A. I. Borhan, D. Ghercă, C. Borca, I. Radu, G. Bulai, A. Pui	2021	n/a	Oral
9	<i>Charge accumulation, conduction band filling and ferroicity</i> , International Workshop of Materials Physics, 6 th Edition, Măgurele, September 14–16, 2021, https://infim.ro/wp-content/uploads/2021/09/Abstract-book-1.pdf , pp. 37–39.	C. M. Teodorescu	2021	n/a	Oral
10	<i>Ferroelectricity and rhombohedral distortion in the electronic band structure of strained PbZrTiO₃</i> , International Workshop of Materials Physics, 6 th Edition, Măgurele, September 14–16, 2021, https://infim.ro/wp-content/uploads/2021/09/Abstract-book-1.pdf , pp. 7–8.	M. A. Husanu, D. G. Popescu, C. I. Bucur, C. Chirila, L. D. Filip, L. Pintilie, L. L. Lev, T. Schmitt, C. M. Teodorescu, V. N. Strocov	2021	n/a	Oral
11	<i>Interplay between surface charge accumulation, conduction band filling and ferroic ordering</i> , 13 th International Conference on Physics of Physics of Advanced Materials (ICPAM–13), Sant Feliu de Guixols, September 24–30, https://icpam.ro/main/wp-content/uploads/BoA-ICPAM-13-v3.pdf , pp. 15–16.	C. M. Teodorescu	2021	n/a	Plenary
12	<i>Investigation by electron spectromicroscopy of the interplay between surface chemistry and polarization landscape of ferroelectric surfaces</i> , 13 th International Conference on Physics of Physics of Advanced Materials (ICPAM–13), Sant Feliu de Guixols, September 24–30, https://icpam.ro/main/wp-content/uploads/BoA-ICPAM-13-v3.pdf , pp. 156–157.	L. E. Abramiuc, L. C. Tanase, N. G. Apostol, M. A. Husanu, C. M. Teodorescu	2021	n/a	Oral
13	<i>Photoelectron spectroscopy: relevant information which can be extracted</i> , 4 th Autumn School on Physics of Advanced Materials (PAMS–4), Sant Feliu de Guixols, September 24–30, https://icpam.ro/main/wp-content/uploads/BoA_PAMS-4-v2.pdf , pp. 55–56.	C. M. Teodorescu	2021	n/a	Plenary
14	<i>Synthesis of vanadium oxide/graphene thin</i>	T. Tite, M. Buga, G.E.	2021	n/a	Poster

	<i>films by physical vapor deposition method for high performance batteries</i> , E-MRS 2021 Fall Meeting Symposium B: “Battery and Energy Storage Devices: from materials to eco-design”, 20-23 Septembrie 2021, B.P1.13	Stan, E. Matei, C. C. Negrila, A.C. Galca, M-C. Bartha, M. Baibarac			
15	<i>Methane combustion over highly effective cobalt-promoted copper-cerium-based LDH-derived mixed oxides catalysts</i> , International Symposium “The environment and the industry”, E-SIMI 2021, Bucharest, September 24, 2021 INTERNATIONAL SYMPOSIUM “THE ENVIRONMENT AND THE INDUSTRY”, E-SIMI 2021, Bucharest, September 24, 2021, http://www.simiecoind.ro/category/book-of-abstracts-e-simi-2021/ , http://www.simiecoind.ro/wp-content/uploads/2021/10/07.pdf , pp. 27–28.	H. M. S. Al-Aani, M. Trandafir, I. Fechete, L. N. Leonat, M. Badea, C. Negrila, I. Popescu, M. Florea, I.-C. Marcu	2021	n/a	Invited
16	<i>Molecular dynamics of species belonging to nematic liquid crystals of alkyl benzoate type and to their composites with oxide nanopowders</i> 13 th International Conference on Physics of Advanced MaterialsThe 13th International Conference on Physics of Advanced Materials, September 24-30, 2021, Sant Feliu de Guixols, Costa Brava, Spain	L. Frunza, I. Zgura, C. P. Ganea, D. Manaila-Maximean, A. Schönhals	2021	n/a	Invited
17	<i>Nanodoping of Liquid Crystals and Polymer Dispersed Liquid Crystals Films</i> 13th International Conference on Physics of Advanced Materials ICPAM-13, 301-302, 2021, September 24-30, 2021, Sant Feliu de Guixols, Costa Brava, Spain	D. Manaila-Maximean, O. Danila, C.P. Ganea, L. Frunza, V. Cîrcu, A. Barar, V. Loiko, A. Konkolovich	2021	n/a	Invited
18	<i>Confinement of molecules with cyan and/or ester functional groups: spectroscopic methods to put in evidence the surface species</i> TIM 20-21 Physics Conference, November 11-13, 2021, Timisoara, Romania	L. Frunza, I. Zgura, C. P. Ganea, N. Apostol, A. Schönhals	2021	n/a	Orala
19	<i>Liquid crystal composites and nanoparticles doping</i> TIM 20-21 Physics Conference, November 11-13, 2021, Timisoara, Romania	D. Manaila-Maximean, C. P. Ganea, L. Frunza, V. Cîrcu, O. Danila, A. Barar, M. Balasoiu, V. Loiko A. Konkolovich	2021	n/a	Plenary
20	<i>Surface functionalization with anticorrosive and antimicrobial biodegradable polymeric implants</i> 1st Corrosion and Materials Degradation Web Conference Session Corrosion and Degradation of Biomaterials, 17–19 May 2021 Online,	A. I. Visan, G. Popescu-Pelin, O. Gherasim, A. Mihailescu, M. Socol, I. Zgura, M. Chiritoiu, L. Sima, F. Antohe, L.	2021	n/a	Orala

	MDPI: Basel, Switzerland, doi:10.3390/CMDWC2021-09897	Radulescu, D. Vranceanu, C. Cotrut, R. Cristescu, G. Socol			
21	<i>Nanoparticles Doping of Some Materials for Organic Optoelectronic Devices</i> CONFERINȚA ȘTIINȚIFICĂ NAȚIONALĂ DE TOAMNĂ, „TRADIȚII ȘI PROGRES ÎN ȘTIINȚA ROMÂNEASCĂ”, 18 – 20 NOIEMBRIE 2021, ACADEMIA OAMENILOR DE ȘTIINȚĂ DIN ROMÂNIA, Bucuresti, PRINT ISSN 2601 - 5102	D. Mănilă-Maximean, V. Loiko, L. Frunza, P. Ganea, V. Cîrcu, O. Dănilă, A. Bărar	2021	n/a	Orala
22	<i>Organic heterostructures with indium-free transparent conductor electrode for optoelectronic applications, Symposium S: Substitution and recycling of critical raw materials in optoelectronic, magnetic and energy devices III</i> , E-MRS 2021 Spring Meeting, 31 mai-4 iunie, Virtual conference	G. Petre, A. Stanculescu, M. Girtan, M. Socol, C. Breazu, L. Vacareanu, M. Grigoras, N. Preda, O. Rasoga, F. Stanculescu,	2021	n/a	Poster
23	<i>Effect of Aluminum nanostructured electrode on the properties of bulk heterojunctions based heterostructures for electronics</i> , E-MRS 2021 Fall Meeting, 20-23 Septembrie 2021 (on-line)	O. Rasoga, C. Breazu, M. Socol, A.-M. Solonaru, L. Vacareanu, G. Petre, N. Preda, A. Stanculescu, F. Stanculescu, G. Socol, M. Girtan, A. Doroshkevich	2021	n/a	Orala
24	<i>Composite materials based on carbon nanoparticles for applications in the field of energy storage and health</i> , Simpozionul National de Chimice, editia a XIII-a, 27 noiembrie 2021, Craiova	M. Baibarac	2021	n/a	Invited
25	<i>Optical and structural characterization of p-type emerging materials for photovoltaics</i> , International e-Conference on Advances in Materials Science, Manonmaniam Sundaranar University, Tirunelveli, Tamil Nadu, India, conferință desfășurată online, 24–26 martie.	A.C. Galca	2021	n/a	Invited Lecture
26	<i>Impurities control on ferroelectric thin films deposited by PLD</i> , IEEE ISAF 2021, conferință desfășurată online, 16 – 21 mai.	C. Chirila, A.G. Boni, V. Stancu, L. Amarande, L. Trupina, C.M. Istrate, R. Cristian, I. Pintilie, L. Pintilie	2021	n/a	Poster
27	<i>Extrinsic and intrinsic losses in $Zr_{0.8}Sn_{0.2}TiO_4$ ceramics investigated by microwave and terahertz spectroscopy</i> , E-MRS 2021 Spring Meeting, Secțiunea: „Current Trends in Optical and X-Ray Metrology of Advanced Materials for Nanoscale Devices”, conferință desfășurată	L. Nedelcu, C.D. Geambasu, M.G. Banciu, M. Burdusel, M.A. Grigoroscuta, P. Badica	2021	n/a	Poster

	online, 21 mai – 3 iunie.				
28	<i>Terahertz and microwave properties of (Ba, Sr)TiO₃ ferroelectric thick films</i> , E-MRS 2021 Spring Meeting, Secțiunea: „Laser Material Processing: From Fundamental Interactions to Innovative Applications”, conferința desfășurată online, 21 mai – 3 iunie.	L. Nedelcu, L. Trupina, C. Chirila, M.G. Banciu, G. Annino, D. Passerieux, A. Ghalem, L. Huitema, A. Crunteanu, P. Carles, C. Constantinescu	2021	n/a	Poster
29	<i>Prediction of optoelectronic properties and stability assessment of mixed-cation mixed-halide perovskite materials using artificial neural networks</i> , 24 th International Conference on Materials, Methods & Technologies, 19–22 august, Burgas, Bulgaria.	N. Filipoiu, T.L. Mitran, D.V. Anghel, M. Florea, I. Pintilie, A. Manolescu, G.A. Nemnes	2021	n/a	Poster
30	<i>Spectroscopic ellipsometry of InSb in the terahertz region</i> , 46 th International Conference on Infrared, Millimeter and Terahertz Waves, conferința desfășurată online, 29 august – 3 septembrie.	V.C. Agulto, T. Iwamoto, K. Toya, V.K. Mag-usara, S. Dolas, N. Newman, L. Nedelcu, M. Tani, M. Nakajima	2012	n/a	Poster
31	<i>CEMS Investigation of CFTS Electrodeposited Films</i> , 36 th International Conference on the Applications of the Mössbauer Effect (ICAME 2021), Brașov, România, 6–9 septembrie.	O. El Khouja, A.C. Galca, K. Nouneh, E. Matei, C.C. Negrila, V. Kuncser	2021	n/a	Poster
32	<i>Perovskite solar cells fabricated by spray coating and doctor-blade in ambient conditions</i> , E-MRS 2021 Fall Meeting, Secțiunea A „Materials for energy applications: hydrogen storage/production, solar cells, super capacitors, thermoelectric & carbon based materials”, conferința desfășurată online, la 20–23 septembrie.	L. N. Leonat, V. Stancu, A. Tomulescu, I. Pintilie	2021	n/a	Poster
33	<i>Electronic and stability properties of alkyl-based two-dimensional halide perovskites</i> , E-MRS 2021 Fall Meeting, Secțiunea „Materials for Energy Applications: Hydrogen Storage/Production, Solar Cells, Super Capacitors, Thermoelectric & Carbon Based Materials”, conferința desfășurată online, 20–23 septembrie.	G.A. Nemnes, N. Filipoiu, T.L. Mitran, S. Derbali, F. Neatu, A. Tomulescu, C. Besleaga, A.G. Mirea, S. Neatu, I. Vlaicu, M. Florea, I. Pintilie	2021	n/a	Oral
34	<i>Structural changes induced by neutron irradiation of gadolinium doped borosilicate glasses</i> , The 13 th International Conference on Physics of Advanced Materials (ICPAM-13), Sant Feliu de Guixols, Spain, conferința desfășurată online, 24–30 septembrie.	M.C. Dinca, B. A.Sava, V. Craciun, O. Dului, V. Bercu, A.C. Galca, M. Eftimie, A. Filip, L. Boroica	2021	n/a	Oral
35	<i>HfO₂/AlN multilayer devices and their functional characterization</i> , The 13 th International Conference on Physics of Advanced Materials (ICPAM-13), Sant Feliu	A. Nitescu, C. Besleaga, A.G. Boni, L. Pintilie	2021	n/a	Oral

	de Guixols, Spain, conferință desfășurată online, 24–30 septembrie.				
36	<i>Downscaling to the critical dimension for stability of the ferroelectric phase in BST ceramics</i> , The 13 th International Conference on Physics of Advanced Materials (ICPAM-13), Sant Feliu de Guixols, Spain, conferință desfășurată online, 24–30 septembrie.	R.E. Patru, M. Botea, C.A. Stanciu, V.A. Surdu, R.D. Trusca, B.S. Vasile, M. Udrea, I. Pintilie, A.C. Ianculescu, L. Pintilie.	2021	n/a	Oral
37	<i>Modificările structurale induse în urma iradierii cu neutroni a sticlelor boro-silicace dopate cu gadolinu (Structural changes induced by neutron irradiation of borosilicate gadolinium doped borosilicate glasses)</i> , A XIII-a Conferință de Știința și Ingineria Materialelor Oxidice (CONSILOX), Alba Iulia, România, 1–3 octombrie.	M.C. Dinca, B.A. Sava, O. Dului, V. Bercu, A.C. Galca, M. Eftimie, A. Filip, L. Boroica	2021	n/a	Oral
38	<i>Dynamic J-V hysteresis in perovskite solar cells: Measurement protocols and physical interpretations</i> , International Conference IUMRS-ICA 2021, conferință desfășurată în format hibrid, Jeju, Coreea de Sud, 3–8 octombrie.	I. Pintilie, G.A. Nemnes, A. Manolescu, C. Besleaga, A. Tomulescu, M. Florea, I.D. Vlaicu, A.G. Mirea, F. Neatu, N. Filipoiu, A. Dragu	2021	n/a	Invited
39	<i>Modes investigation of prismatic dielectric elements for microwave antennas</i> , 44 th International Semiconductor Conference – CAS 2021, conferința desfășurată online, 6 – 8 octombrie.	M.G. Banciu, C.D. Geambasu, L. Nedelcu	2021	n/a	Oral
40	<i>Doped vanadium oxide films by physical vapour deposition method for energy storage application</i> , 23 rd International Conference “New Cryogenic and Isotope Technologies for Energy and Environment” EnergEn 2021, Băile Govora, România, conferință desfășurată online, 26–29 octombrie.	T. Tite, H. Ghannam, M. Buga, C. Ungureanu, A.A. Zaulet, I. Stavarache, E. Matei, G.E. Stan, C.C. Negrila, A.C. Galca, M.C. Bartha, M. Baibarac	2021	n/a	Oral
41	<i>Advanced electrode based on zinc oxide-graphene for sodium-ion battery: Influence of morphology and doping</i> , 23 rd International Conference “New Cryogenic and Isotope Technologies for Energy and Environment” EnergEn 2021, Băile Govora, România, conferință desfășurată online, 26–29 octombrie.	H. Ghannam, T. Tite, A. Chahboun, M. Buga, C. Ungureanu, A. A. Zaulet, A.C. Galca, M. Y. Zaki, E. Matei, I. Stavarache, C.C. Negrila, G.E. Stan, M.C. Bartha, M. Baibarac	2021	n/a	Poster
42	<i>3D flexible electrodes for in vivo measurements in cell cultures based on conductive electrospun polymeric fibers</i> XXVIth International Symposium on	M. M. Barsan, C. G. Sanz, A. Serban, A. Evanghelidis, I. Enculescu, V.C.	2021	n/a	Invited Oral

	Bioelectrochemistry and Bioenergetics, 9-14 of May	Diculescu			
43	<i>A new amperometric 20S proteasome biosensor for proteasome activity and inhibitor screening</i> 3rd European BioSensor Symposium, 9-12 of March	M. M. Barsan, V. C. Diculescu	2021	n/a	Poster
44	<i>Applications of Conductive Electrospun Polymeric Fibers in DNA Biosensing</i> XXVIth International Symposium on Bioelectrochemistry and Bioenergetics, 9-14 of May	A. Aldea, E. Matei, I. Enculescu, V. C. Diculescu	2021	n/a	Poster
45	<i>Disposable SOD biosensors based on metallized electrospun polymeric fibers for the detection of superoxide in cell culture media</i> XXVIth International Symposium on Bioelectrochemistry and Bioenergetics, 9-14 of May	Caroline G. Sanz, Anca Aldea, Ricardo J.B. Leote, Madalina M. Barsan	2021	n/a	Poster
46	<i>Evaluation of anti-cancer drug shikonin interaction with dsDNA in incubated solutions and in situ sensing at DNA biosensors</i> XXVIth International Symposium on Bioelectrochemistry and Bioenergetics, 9-14 of May	Caroline G. Sanz, Ricardo J. B. Leote, Victor C. Diculescu	2021	n/a	Oral
47	<i>Hydrazide-based Materials for Carbonyl Detection in Oxidized Proteins.</i> 72nd Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry, Jeju – South Korea 29 August – 3 September	D. N. Crisan, T. A. Enache, V. C. Diculescu	2021	n/a	Poster
48	<i>Electrospun fibers electrodes coated with conductive polymers for FOLED applications</i> 14th International Symposium on Flexible Organic Electronics (ISFOE21) 5-8 July, Thessaloniki, Greece	I.C. Ciobotaru, C.C. Ciobotaru, M. Beregoi, A. Evanghelidis, S. Polosan, I. Enculescu	2021	n/a	Poster
49	<i>Cells Under Irradiation – Electrochemical Evaluation</i> XXVIth International Symposium on Bioelectrochemistry and Bioenergetics of the Bioelectrochemical Society, 10– 15.05, Cluj, Romania	T.A. Enache, M.L. Onea, M. Bacalum	2021	n/a	Poster
50	<i>Bio-Sensing properties of Single ZnO nanowire Field Effect Transistor</i> 72nd Annual Meeting of the International Society of Electrochemistry (online, 29-03 Septembrie)	M. L. Onea, A. Enache, E. MateiI, M. Enculescu, I. Enculescu	2021	n/a	Oral
51	<i>Ni nanowires properties for Functional Magnetic Materials Applications</i> Conferința Societății de Microscopie Electronică din România, Magurele, 21-22 octombrie 2021	M. L. Onea, A. Enache, E. MateiI, M. Enculescu, I. Enculescu	2021	n/a	Oral
52	<i>Trilayer non-volatile memory structures with</i>	C. Palade, A.M.	2021	n/a	Poster,

	<i>floating gate of SiGeSn nanocrystals embedded in HfO₂</i> , Materials Challenges for Memory - MCFM 2021, 11-13.04.2021, online	Lepadatu, A. Slav, I. Stavarache, O. Cojocaru, V.A. Maraloiu, V.S. Teodorescu, T. Stoica, M.L. Ciurea			
53	<i>Ferroelectric orthorhombic HfO₂ phase in 3-layer memory structures of control HfO₂ /floating gate of Ge nanoparticles in HfO₂ /tunnel HfO₂ on Si wafers</i> ”, Materials Challenges for Memory - MCFM 2021, 11-13.04.2021, online	C. Palade, A.M. Lepadatu, A. Slav, O. Cojocaru, A. Iuga, V.A. Maraloiu, A. Moldovan, M. Dinescu, V.S. Teodorescu, T. Stoica, M.L. Ciurea	2021	n/a	Poster,
54	<i>Analytical Electron Microscopy for Materials Science: Introductory Notions</i> HERCULES Specialized Course 2021: The multi-technique approach of CERIC-ERIC as a tool for Nanoscience, 31.05 - 09.06.2021, online	C. Ghica	2021	n/a	Lectie invitata,
55	<i>Introduction to Electron Paramagnetic Resonance (EPR) Spectroscopy</i> HERCULES Specialized Course 2021: The multi-technique approach of CERIC-ERIC as a tool for Nanoscience, 31.05 - 09.06.2021, online	M. Stefan	2021	n/a	Lectie invitata,
56	<i>Applications of EPR in Materials Science</i> HERCULES Specialized Course 2021: The multi-technique approach of CERIC-ERIC as a tool for Nanoscience, 31.05 - 09.06.2021, online	D. Ghica	2021	n/a	Lectie invitata,
57	<i>Ni-doped Goethite nanoparticle systems for catalysis applications</i> , International Conference on the Applications of the Mossbauer Effect, 5-10.09.2021, Brasov	A.C. Kuncser	2021	n/a	Poster,
58	<i>From Ge quantum dots to SiGe nanocrystals with higher stability and extended short-wave infrared sensitivity</i> , EMRS 2021 Fall Meeting, 20-23.09.2021, online	A.M. Lepadatu, C. Palade, A. Slav, I. Dascalescu, O. Cojocaru, V.S. Teodorescu, T. Stoica, M.L. Ciurea, Prezentare orală	2021	n/a	Prezentare orală,
59	<i>SiGeSn quantum dots for non-volatile memories</i> , EMRS 2021 Fall Meeting, 20-23.09.2021, online	A.M. Lepadatu, C. Palade, I. Dascalescu, A. Slav, I. Stavarache, A.V. Maraloiu, V.S. Teodorescu, T. Stoica, M.L. Ciurea	2021	n/a	Prezentare orală,
60	<i>Synergistic enhancement of SWIR</i>	I. Dascalescu, N.C.	2021	n/a	Prezentare

	<i>photosensitivity in nanocrystals/epitaxial heterojunctions of GeSn layers</i> , EMRS 2021 Fall Meeting, 20-23.09.2021, online	Zoita, A. Slav, A.M. Lepadatu, C. Palade, D. Buca, V.S. Teodorescu, M.L. Ciurea, M. Braic, T. Stoica			orala,
61	<i>Nanocrystallization of GeSn thin layers controlled by SiO₂ spacer in multilayers</i> , EMRS 2021 Fall Meeting, 20-23.09.2021, online	A. Slav, I. Dascalescu, A.M. Lepadatu, C. Palade, V.S. Teodorescu, M.L. Ciurea, M. Braic, T. Stoica	2021	n/a	Prezentare orala,
62	<i>From GeSi to SiGeSn alloy nanocrystals with benefits in SWIR detection</i> , 13th International Conference on Physics of Advanced Materials (ICPAM-13), 24-30.09.2021, Sant Feliu de Guixols, Costa Brava, Spain	M.L. Ciurea, T. Stoica, I. Stavarache, A.M. Lepadatu, C. Palade, A. Slav, I. Dascalescu, O. Cojocaru	2021	n/a	Prezentare invitata,
63	<i>Deposition and characterization of thin films based on nanostructured NiO as sensorial element for detection gases</i> , Workshop on "Contemporary Solutions for Advanced Catalytic Materials with a High Impact on Society", 11-15.10.2021, Bucuresti	A. Sobetkii, R.E. Irimescu, A.E. Slobozeanu, C.F. Ciobota, U. Cindemir, L. Osterlund, A. Stanoiu, C.E. Simion, R.M. Piticescu	2021	n/a	Prezentare orala,
64	<i>Nanocrystallization of GeSn thin layers controlled by SiO₂ spacer in multilayers</i> , 2021 International Semiconductor Conference - CAS 2021, 06 - 08.10.2021, online	A. Slav, I. Dascalescu, A.-M. Lepadatu, C. Palade, V.S. Teodorescu, M.L. Ciurea, M. Braic, T. Stoica	2021	n/a	Prezentare orala,
65	<i>In-situ magnetron sputtering co-deposition of Ge nanoparticles in Si₃N₄ films for near infrared detection</i> , 2021 International Semiconductor Conference - CAS 2021, 06 - 08.10.2021, online	I. Stavarache, C. Palade, P. Prepelita, V.S. Teodorescu, M.L. Ciurea	2021	n/a	Poster,
66	<i>Memory properties of GeZrO₂ based trilayer structure</i> , 2021 International Semiconductor Conference - CAS 2021, 06 - 08.10.2021, online	C. Palade, A. Slav, M.L. Ciurea	2021	n/a	Poster,
67	<i>Magnetism on a 3D playground</i> , 4-th Conference of the Romanian Electron Microscopy Society - CREMS 2021, 21-22.10.2021, Magurele	A. C. Kuncser	2021	n/a	Prezentare orala,
68	<i>Morphological and structural characterization of Gd doped SnO₂ for chemo-resistive gas sensors applications</i> , 4-th Conference of the Romanian Electron	C. Mihalcea	2021	n/a	Prezentare orala,

	Microscopy Society - CREMS 2021, 21-22.10.2021, Magurele				
69	<i>New trends in electron and X-ray diffraction techniques</i> , 4-th Conference of the Romanian Electron Microscopy Society - CREMS 2021, 21-22.10.2021, Magurele	A. M. Vlaicu	2021	n/a	Prezentare orală,
70	<i>On the stabilization of the orthorhombic phase pure ZrO₂ thin films through substrate orientation control</i> , 4-th Conference of the Romanian Electron Microscopy Society - CREMS 2021, 21-22.10.2021, Magurele	C. Istrate	2021	n/a	Prezentare orală,
71	<i>New software for 3D characterization of nanoparticle systems</i> , 4-th Conference of the Romanian Electron Microscopy Society - CREMS 2021, 21-22.10.2021, Magurele	C. Radu	2021	n/a	Prezentare orală,
72	<i>Revealing chemical ordering in BaLnCo₂O_{6-δ} double perovskites by atomic-resolution analytical TEM</i> , 4-th Conference of the Romanian Electron Microscopy Society - CREMS 2021, 21-22.10.2021, Magurele	C. Ghica	2021	n/a	Prezentare orală,
73	<i>The role of the dopant in the morphology and structure of Gd-doped SnO₂ nanoparticles for applications in chemo-resistive gas sensing</i> , TIM 20-21 Physics Conference, 11 – 13.11.2021, Timisoara (online)	C. G. Mihalcea, C. Ghica, C. E. Simion, I. D. Vlaicu, D. Ghica, I. V. Dinu, O. G. Florea, A. Stanoiu	2021	n/a	Prezentare orală,
74	<i>On the stabilization of the orthorhombic phase pure ZrO₂ thin films through substrate orientation control</i> , TIM 20-21 Physics Conference, 11 – 13.11.2021, Timisoara (online)	C.-M. Istrate, C. Ghica, C. Radu	2021	n/a	Prezentare orală,
75	<i>New software for 3D characterization of nanoparticle systems</i> , TIM 20-21 Physics Conference, 11 – 13.11.2021, Timisoara (online)	C. Radu, C. Istrate	2021	n/a	Poster,
76	<i>The use of mesoporous NiWO₄, Pt/NiWO₄ and their composites with graphene nanoplatelets as bifunctional electrocatalysts for ORR and HOR</i> , 45th International Conference and Exposition on Advanced Ceramics (ICACC 2021), February 8 – 12, Virtual Event, SUA	Mihaela Florea, Simona Somacescu, Jose Maria Calderon Moreno, Petre Osiceanu, Daniela Culita, Florentina Neațu, Ștefan Neațu, Mihaela M. Trandafir, Irina Borbath, Emilia Talas, András Tompos	2021	n/a	Oral
77	<i>Different strategies for supporting Pd on MAX phases - efficient catalysts in chemoselective</i>	Iuliana M. Chirica, Mihaela M. Trandafir,	2021	n/a	Poster

	<i>hydrogenation reactions</i> , 45th International Conference and Exposition on Advanced Ceramics (ICACC 2021), February 8 – 12, Virtual Event, SUA	Florentina Neatu, Ștefan Neatu, Andrei C. Kuncser, Varun Natu, Michel W. Barsoum, Mihaela Florea			
78	<i>NiWO₄, Pt/NiWO₄ and their composites with graphene nanoplatelets as bifunctional electrocatalysts for ORR and HOR</i> , Catalysis Science & Technology 10 th Anniversary symposium 2021, November 16 – 17, Virtual Event UK	M. Florea, S. Somacescu, J. M. Calderon Moreno, P. Osiceanu, D. Culita, b F. Neațu, Ș. Neațu, a M. M. Trandafir, I. Borbath, E. Talas, A. Tompos	2021	n/a	Oral
79	<i>Mxenes surface modification to obtain solid acids</i> , 2 nd International Workshop on Functional MAX-materials (FunMAX 2021), 14-17 Septembrie, Krasnoyarsk, Russia.	Florentina Neațu, Iuliana M. Chirica, Ștefan Neațu, Michel W. Barsoum, Mihaela Florea	2021	n/a	Poster
80	<i>Selective oxidation of p-cymene using MAX Phase catalysts</i> , Catalysis Science & Technology Symposium 2021, 16-17 noiembrie, Virtual Event UK	Iuliana M. Chirica, Mihaela Trandafir, Florentina Neațu, Ștefan Neațu, Michel W. Barsoum, Mihaela Florea	2021	n/a	Poster
81	<i>The development of a catalytic/photocatalytic hybrid system for chemical warfare agents decontamination of sensitive equipment</i> , Catalysis Science & Technology Symposium 2021, 16-17 noiembrie, Virtual Event UK	S. Neațu, F. Neațu, M. Florea, A.G. Mirea, N. Petrea, N. Gheorghiu, V. Șomoghi	2021	n/a	Poster
82	<i>Catalytic properties of MAX phases in selective oxidation reactions</i> , 2 nd International Workshop on the properties of Functional MAX Materials (2 nd FunMAX 2021), 14-17 Septembrie, Krasnoyarsk, Russia.	Iuliana M. Chirica, Mihaela M. Trandafir, Florentina Neațu, Ștefan Neațu, Michel W. Barsoum, Mihaela Florea		n/a	Oral
83	<i>Influence of Viscosity on Radial Diffusion of Fluids in Paper Substrates</i> , The 12th International Symposium on Advanced Topics in Electrical Engineering, March 25-27, Bucharest, Romania	D. Botta	2021	n/a	Oral
84	<i>The Influence of Surface Tension on Radial Wicking in Paper</i> The 10th International Conference on ENERGY and ENVIRONMENT, October, 14-15, Bucharest, Romania	D. Botta	2021	n/a	Oral
85	<i>Magnetic materials for electrodes and nanoparticles and their applications in</i>	V. C. Diculescu, M. M. Barsan, T. A.	2021	n/a	Oral

	<i>biosensing</i> 3rd European BioSensor Symposium, Wildau, Germania, 09 - 12 Martie	Enache, E. Matei, M. Enculescu, N. Apostol, I. Enculescu			
86	<i>Sm₂O₃-SmO Modified Gold Electrodes: Development, Characterization and (Bio)sensing applications</i> 3rd European BioSensor Symposium, Wildau, Germania, 09 - 12 Martie	R. Leote, M. Enculescu, C. M. Teodorescu, V. Diculescu	2021	n/a	Oral
87	<i>Flexible Electrodes as Platforms for Bio(sensors) for Biomarker Monitoring in Sweat</i> XXVIth International Symposium on Bioelectrochemistry and Bioenergetic, Cluj, Romania, 9-13 Mai	R. J. B. Leote, A. Aldea, E. Matei, V. C. Diculescu,	2021	n/a	Oral
88	<i>Flexible Bio(sensors) for Point-of-Care Biomedical Applications</i> 72 nd annual meeting of the International Society o Electrochemistry, Jeju, South Korea, 29 th August to 3 rd September	R. J. B. Leote, C. G. Sanz, A. Aldea, M. M. Barsan, V. C. Diculescu	2021	n/a	Oral
89	<i>Imaging vortex-antivortex pairs in high Tc superconductors,</i> Nanoengineered Superconductors - NES21, Young Investigator's online workshop, May 10- 12, 2021,	Alina IONESCU, Julian SIMMENDINGER, Manuel BIHLER, Markus WEIGAND, Gisela SCHÜTZ, Joachim ALBRECHT	2021	n/a	Invited talk
90	<i>Mössbauer study of iron nitride with ordered martensite structure prepared by chemical methods, a promising material for rare earth free magnets,</i> International Conference on the Applications of the Mössbauer effect - ICAME2021, 5-10 September 2021, Brasov, Romania, Book of Abstracts ICAME 2021, page 85, ISBN:978-606-94603-3-7	P. Palade, C. Comanescu, N. Iacob, C. Plapcianu, I. Mercioniu	2021	n/a	Oral presentation
91	<i>Phase control in Co-Fe-O nanosystems over a wide pH range (3-13) ,</i> International Conference on the Applications of the Mössbauer effect - ICAME2021, 5-10 September 2021, Brasov, Romania, Book of Abstracts ICAME 2021, page 175, ISBN:978-606-94603-3-7	C. Comanescu, P. Palade, V. Kuncser	2021	n/a	Poster
92	<i>Comparative Mossbauer studies of 3d-4f nanostructures processed by unconventional methods,</i> International Conference on the Applications of the Mossbauer Effect, 5-10 September, Brasov-Romania, Book of Abstracts ICAME 2021, page 180, ISBN:978-	Cristina Bartha, Mihai Grigoroscuta, Simona Greculeasa, Nicusor Iacob and Petre Badica	2021	n/a	Poster

	606-94603-3-7				
93	<i>New design of orthosis</i> , 11 th APMAS 2021 International Advances in Applied Physics & Materials Science Congress & Exhibition, 17 – 23 octombrie 2021, Fethiye – Mugla, Turcia	N.D. Batalu, N. Dobre, I.O. Trancu, B. Dumitriu, L. Olariu, M.A. Grigoroscuta, M. Burdusel, P. Badica	2021	n/a	Poster
94	<i>Bio-assessment of MgB₂</i> , 7 th ENEFM 2021, 17 – 23 octombrie 2021, Fethiye – Mugla, Turcia	P. Badica, M.A. Grigoroscuta, M. Burdusel, G. Aldica, D. Batalu, M.C. Chifiriuc, B.G. Dumitriu, L. Olariu		n/a	Invited talk
95	<i>Development of sub-miniaturized testing for W-Cu joints extracted from the ITER-specification monoblock</i> , ICFRM-20 International Conference on Fusion Reactor Materials, 24 - 29 Oct 2021, Granada, Spain (online)	Kateryna OLESHCHUK, Dmitry TEREPTYEV, Andrei GALATANU, Chih-Chen CHANG, Olga KACHKO, Kim VERBEKEN	2021	n/a	Poster
96	<i>Unidirectional Magnetic Anisotropy in Molibden Dioxide – Hematite Mixed Oxide Nanostructures</i> , International Conference on the Applications of the Mossbauer Effect, 5-10 September, ICAME 2021, Brasov-Romania, Book of Abstracts ICAME 2021, ISBN:978-606-94603-3-7	Felicia Tolea, Lucian Diamandescu, Monica Sorescu, Mihaela Valeanu, Mugurel Tolea, Victor Kuncser	2021	n/a	Oral presentation
97	<i>Specific behaviour of the fe-Ni-Co-Ti shape memory ribbons evidenced by Mössbauer spectroscopy</i> , ICAME 2021, Brasov-Romania	Felicia Tolea, Mihaela Sofronie, Bogdan Popescu, Mugurel Tolea, Victor Kuncser, Mihaela Valeanu.	2021	n/a	Poster
98	<i>Mössbauer investigations of functionalized Fe₃O₄ nanoparticles for drug delivery</i> , - ICAME2021, 5-10 September 2021, Brasov, Romania, Book of Abstracts ICAME 2021, page 229, ISBN:978-606-94603-3-7	Gabriel Schinteie , Nicusor Iacob , Petru Palade , Adrian Maraloiu , Corneliu Ghica , Izabela Jinga , Gabriel Socol , Victor Kuncser	2021	n/a	Poster
99	<i>Heterogeneous nanosystems with core-shell configurations studied by mössbauer spectroscopy</i> , International Conference on the Applications of the Mossbauer Effect, 5-10 September, Brasov-Romania, Book of Abstracts ICAME 2021, page 49, ISBN:978-606-94603-3-7	S.G. Greculeasa, P. Palade, G. Schinteie, A. Leca, N. Iacob, A. Kuncser, F. Dumitrache, I. Lungu, G. Prodan, M. Cernea, R. Radu, R.M. Costescu, B.S. Vasile, V.A. Surdu, R.Trusca, H. Amorín, V. Kuncser	2021	n/a	Invited talk
101	<i>Novel superdielectric composites</i> ,	Simona Gabriela	2021	n/a	Oral

	TIM 20-21, November 11th, 2021, virtual, CMP-O06	Greculeasa, Cezar Comanescu, Nicușor Iacob, Andrei Kuncser, Luminița Amarande, Marius Cioanger, Mihai Burdușel, Valentin Teodorescu			presentation
102	<i>Tuning the magnetic properties of fe-gd amorphous thin films of various thicknesses by crossing the compensation composition</i> , International Conference on the Applications of the Mossbauer Effect, 5-10 September, Brasov-Romania, Book of Abstracts ICAME 2021, page 185, ISBN:978-606-94603-3-7	C. Locovei, N.Iacob , G.Schinteie , A.Leca , V. Kuncser	2021	n/a	Poster
103	<i>Tuning spin configurations and magneto-resistive properties of Fe based RE-TM microwires via chirality effects</i> , International Conference on the Applications of the Mossbauer Effect, 5-10 September, Brasov-Romania	A.E. Stanciu, N. Iacob, G. Schinteie, P. Palade, B. Popescu, B. Borca, V. Kuncser.	2021	n/a	Poster
104	<i>Characterization of Roman bricks from Romula (Olt County, Romania) by Mössbauer Spectroscopy</i>	Andrei Alexandru-Dinu, Mircea Negru, Dan Batalu, Victor Kuncser, Petre Badica	2021	n/a	Poster
105	<i>Mossbauer investigation of Fe-Co-Fe₃O₄ nanoclusters for magnetorheological applications</i> , International Conference on the Applications of the Mossbauer Effect, 5-10 September, Brasov-Romania	N.Iacob, A.Kuncser, A.Galatanu, Izabell Craciunescu, Rodica Turcu, V. Socoliuc, L Vekas, Mirela Codescu,Elena Chitanu, V.Kucser	2021	n/a	Poster

4.2.3. Lucrări publicate în alte publicații relevante:

Nr. ctr.	Autori	Titlul comunicării științifice	Revista/Editura-conferința (cod ISSN, ISBN)	Identificator lucrare (vol, pag-pag, an DOI)
1	LC Cotet, A Mihis, K Magyari, M Muresan Pop, LC Pop, A Mihaila, I Szekeley, S Dragan, M Dudescu, I Zgura, E	Mixture of Graphene Oxide/Phosphoric Acid/Melamine as Coating for Improved Fire Protective Performance and Enhancement of Surface Electrical Properties on Wood Chipboard.	Journal of nanoscience and nanotechnology 21 (4) , pp.2312-2322	2021

	Matei, M Baia, M Baibarac, I Anghel, L Baia			
2	A. Udrescu, N. Toulbe, E. Matei, M. Baibarac	Azathioprine Electrochemical Adsorption onto the Reduced Graphene Oxide Sheets in Absence and in the Presence of Polyaniline.	Journal of nanoscience and nanotechnology 21 (4) , pp.2302- 2311	2021
3	M Daescu, M Baibarac, M Enculescu, C Serbschi	Screen-Printed Carbon Electrodes Modified with Double-Walled Carbon Nanotubes Functionalized with Polypyrrole and Their Electrochemical Processes in the Presence of Folic Acid.	Journal of nanoscience and nanotechnology 21 (4) , pp.2376- 2387	2021
4	Pop Lucian- Cristian, Baibarac, Mihaela, Anghel Ion, Baia Lucian	Gypsum Composite Boards Incorporating Phase Change Materials: A Review.	Journal of nanoscience and nanotechnology 21 (4) , pp.2269- 2277	2021
5	M. Elisa, S.M. Iordache, A- M. Iordache, I.C. Vasiliu, B.A. Sava, L. Boroica, M.C. Dinca, A.V. Filip, A.C. Galca, C. Bartha, V. Kuncser, M. Eftimie	Synthesis and complex characterization of a zinc phosphate-tellurite glass as Faraday rotators	Optoelectronics into a Powerfull Economy, Book of Proceedings, ISBN: 978-973-720-822-4, pp. 135–145.	2021
6	Chiriac, A; Ion, G; Stan, G; Munteanu, S.; Dobrin, N; Turliuc, D; Poeata, I	The 3D printed models technology for the management of intracranial aneurysms	ROM NEUROSURG, 34, pp.373– 378	2021
7	C. Palade, A. Slav, M.L. Ciurea	Memory properties of GeZrO ₂ based trilayer structure	IEEE International Semiconductor Conference CAS 2021 Proceedings, ISBN: 978-0-7381-2665-4, pages 253-256, IEEE 2021	2021
8	I. Stavarache,	In-situ magnetron sputtering	IEEE International Semiconductor	2021

	C. Palade, P. Prepelita, V.S. Teodorescu, M.L. Ciurea	co-deposition of Ge nanoparticles in Si ₃ N ₄ films for near infrared detection	Conference CAS 2021 Proceedings, ISBN: 978-0-7381-2665-4, pages 261-264, IEEE 2021	
9	C. Comanescu, P. Palade, V. Kuncser	Mössbauer spectroscopy investigation of Fe oxide nanoparticles synthesized by a novel hydrothermal process over a wide pH range (3-13)	Hyperfine Interactions volume 242, Article number: 42	2021
10	C. Locovei, N. Iacob, G. Schinteie, A. E. Stanciu, A. Leca, V. Kuncser	Tuning the magnetic properties of amorphous Fe-Gd thin films by variation of thickness and composition	Hyperfine Interactions volume 242, Article number: 44	2021
11	Petre Badica, Andrei Alexandru-Dinu, Mihai Grigoroscuta, Claudiu Locovei, Andrei Kuncser, Cristina Bartha, Gheorghe Aldica, Negru Mircea, Dan Batalu, Nicolae Cruceru, Ionut Savulescu	Kaolin clay pottery discovered in the Roman city of Romula (Olt county, Romania)	Journal of Archaeological Science: Reports, 36(36) DOI: 10.1016/j.jasrep.2021.102899	2021

Lucrari ISI care nu apar in WOS in prezent

Nr.	Titlul articolului	Numele Jurnalului, Volumul, Pagina nr.	Nume Autor	Anul publicării
1.	Rhodamine B photodegradation in aqueous solutions containing nitrogen doped TiO ₂ and carbon nanotube composites,	Molecules 26(23), 7237	A Udrescu, S Florica, M Chivu, I Mercioniu, E Matei, M Baibararac	2021
2.	Multifunctional leather surfaces coated with nanocomposites through conventional and unconventional methods,	Materials Today: Proceedings, In press 10.1016/j.matpr.2021.09.377	CA Alexe, C. Gaidau, M Stanca, A Radu, M Stroe, M Baibarac G Mateescu, A Mateescu, IR Stanculescu	2021
3.	Organic heterostructures with indium-free transparent conductor electrode for optoelectronic applications, Symposium S: Substitution and recycling of critical raw materials in optoelectronic, magnetic and energy devices III, Accepted for publication in	Physica status solidi a, https://doi.org/10.1002/pssa.202100521	G. Petre, A. Stanculescu, M. Girtan, M. Socol, C. Breazu, L. Vacareanu, M. Grigoras, N. Preda, O. Rasoga, F. Stanculescu,	2021

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	-	
Lege	-	
Ordin ministru	-	
Decizie președinte	-	
Standard	-	
Altele (se vor preciza)	-	

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	4	Market Watch
Cărți	-	-
Reviste	4	Market Watch
Bloguri	4	Contributors.ro
Altele (se vor preciza)	4	Scoala Altfel Noaptea Cercetatorilor

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

Tip	Anul 2021
Tehnologii/produse	5/12
Procedee/retete/formule	4/4/1
Metode	3
Altele asemenea (se vor specifica)	1 tutorial si 1 cod de calcul

Din care:

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

Cereri de brevete depuse

	Nr.propuneri brevete	Anul înregistrării	Autorul/Autorii	Numele propunerii de brevet
OSIM	1.	A00028/02.02.2021	Fejer Szilard, Baibarac Mihaela	Procedeu chimic de asamblare a senzorilor bazati pe oxid de grafena functionalizati cu polidifenilamina pentru detectia hormonului de stimulare tiroidiana
	2.	A00101/09.03.2021	Daniel Nicolae Crisan, Teodor Adrian Enache, Diculescu Victor Constantin	Procedeu pentru functionalizarea suprafetelor cu dendrimeri cu terminatii hidrazida si aplicatii ale acestora pentru imobilizarea si detectia de (bio)moleculelor ce contin grupari chimice carbonil
	3.	A00102/09.03.2021	Teodor Adrian Enache, Diculescu Victor Constantin	Dispozitiv automatizat cu detectie electrochimica pentru probe multiple
	4.	A00103/09.03.2021	Diculescu Victor Constantin, Maria-Monica Enculescu	Fibre electrofilate cu acoperire metalica si

				oligonucleotide de catena simpla cu grupari tiofosfat cu aplicatii in domeniul biosenzorilor electrochimici pentru detectia de biomarker-i
	5.	A00104/09.03.2021	Kuncser Andrei Crisan, Radu Cristian, Vlaicu Ioana Dorina	Metoda computationala de analiza corelata 3D a sistemelor de nanoparticule magnetice
	6.	A00128/25.03.2021	Diculescu Victor Constantin, Branco Leote Ricardo Jose, Enache Teodor Adrian, Ignat-Barsan Madalina Maria, Enculescu Maria Monica	Biosenzor electrochimic pentru determinarea acidului uric in fluide biologice
	7.	A00156/05.04.2021	Cotirlan-Simionuc Costel	Metasuprafete integrate intr-o structura activa compacta pentru controlul polarizarii si maririi imaginilor fara aberatii optice, utilizand cristale piezoelectrice
	8.	A00193/22.04.2021	Palade Catalin, Stavarache Ionel, Slav Adrian, Lepadatu Ana-Maria, Dascalescu Ioana, Toma Stoica, Ciurea Lidia Magdalena	Film de GeSi – HfO ₃ nanostructurat fotosensibil in domeniul fereastra de lungimi de unda 1200...1600 nm
	9.	A00194/22.04.2021	Stanculescu Anca-Ioana, Stanculescu Florin-Gabriel, Socol Marcela	Metode de control al cristalizarii compusilor organici cu molecula mica in sisteme Bridgman-Stockbarger
	10.	A00209/26.04.2021	Crisan Ovidiu Alexandru, Crisan Alina Daniela, Leca Aurel	Nanoclusteri metalici FePt, metoda lor de obtinere si de functionalizare duala, superficiala a acestora pentru aplicatii de terapie hipertermica controlata.
	11.	A00238/10.05.2021	Predoi Daniela, Iconaru Simona-Liliana, Ciobanu Steluta Carmen	Obtinerea si caracterizarea straturilor subtiri de hidroxiapatita dopata cu magneziu intr-o matrice de chitosan obtinute prin tehnica de acoperire in imersie
	12.	A00247/12.05.2021	Miclea Corneliu Florin, Miclea Cornel, Cioangher Marius, Amarande Luminita, Miclea Luminita	Dispozitiv de testare în vitro a proliferării celulare pe medii stresate mecanic în atmosferă controlată, cu

			Claudia	precizie ridicată a controlului forței aplicate
	13.	A00278/25.05.2021	Baibarac Mihaela, Trandabat Alexandru Florentin, Ciobanu Romeo Cristian	Procedeu de evaluare a unghiului de adsorbție al polimerilor termoplastici pe suprafața particulelor ceramice
	14.	A00305/02.06.2021	Kuncser Andrei Cristian, Iacob Nicusor, Kuncser Victor-Eugen	Procedeu de investigare automata a unor distribuții caracteristice fragmentelor metalice rezultate în urma exploziilor
	15.	A00322/09.06.2021	Badica Petre, Batalu Nicolae-Dan, Balint Emilia Florica, Tudor Niculae, Burdusel Mihail, Grigorescu Mihai-Alexandru, Aldica Gheorghe Virgil, Trancu Ioan Ovidiu, Chifiriuc Mariana Carmen, Barbuceanu Florica, Peteoaca Alexandra, Micsa Catalin	Sistem bicomponent compozit biodegradabil pentru materiale de osteosinteza cu control biomecanic
	16.	A00375/29.06.2021	Predoi Daniela, Iconaru Simona-Liliana, Ciobanu Steluta Carmen, Predoi Gabriel	Utilizarea pulberilor de Fe ₃ O ₄ și Fe ₃ O ₄ functionalizate cu celuloza pentru aplicatii de mediu
	17.	A00376/29.06.2021	Predoi Daniela, Iconaru Simona-Liliana, Ciobanu Steluta Carmen, Predoi Gabriel	Obținerea în laborator a nanoparticulelor de fier cu valență zero cu aplicatii în decontaminarea apelor
	18.	A00404/14.07.2021	Crisan Ovidiu Alexandru, Crisan Alina Daniela, Leca Aurel, Dan Ioan	Aliaj magnetic CoZr cu faze L1 ₀ și procedeu de obținere
	19.	A00423/22.07.2021	Baibarac Mihaela, Mogos Alin-Marian	Suport de ITO modificat cu oxid de grafenă redus functionalizat cu nanoparticule de aur pentru aplicatii în domeniul detecției optice a compusilor farmaceutici
	20.	A00487/16.08.2021	Baibarac Mihaela, Serbschi Constantin	Electrod serigrafat de carbon modificat cu oxid de grafenă funcționalizat cu polipirrol dopat cu heteropolianionii acidului fosformolibdic
	21.	A00488/16.08.2021	Baibarac Mihaela, Serbschi Constantin	Aparate electronice pentru măsurarea automata a concentrației de acid folic

				in urina
	22.	A00553/15.09.2021	Valentin Serban Teodorescu, Valentin Adrian Maraloiu, Corneliu Ghica, Cosmin Marian Istrate	Metoda rapida neconventionala de preparare a probelor TEM din materiale oxidice, compozite si filme subtiri
	23.	A00590/28.09.021	Predoi Daniela, Iconaru Simona-Liliana, Ciobanu Steluta Carmen	Sistem bioceramic complex de tipul ZnHAp/ZnO pentru regenerarea tesuturilor, preventia si tratamentul osteoporozei
	24.	A00712/25.11.2021	Baibarac Mihaela, Smaranda Ion, Dinescu Monica, Stroe Malvina, Zgura Irina, Nastac Daniela, Cramariuc Oana	Compozite bazate pe poli (o-fenilendiamina), poli metil metacrilat si nanotuburi de carbon cu un singur perete pentru aplicatii in domeniul sanatatii
	25.	A00713/25.11.20221	Ignat-Barsan Madalina-Maria, Caroline Gomes, Anca Aldea	Biosenzor enzimatic pe baza de fibre electrofilate acoperite cu aur si superoxid dismutaza pentru detectie de superoxid
	26.	A00724/02.12.2021	Polosan Silviu Pavel, Ciobotaru Claudiu Constantin	Material fosfoteluric folosit ca absorber de radiatie 10.6 μm pentru laserul cu dioxid de carbon
	27.	A00729/03.12.2021	Buruiana Angel-Theodor, Sava Florinel, Iacob Nicusor, Matei Elena, Bocirnea Elena Amelia, Oanea Melania, Galca Aurelian-Catalin, Mihai Claudia, Velea Alin, Kuncser Victor	Senzor de temperaturi criogenice bazat pe plachete micrometrice hexagonale de seleniura de crom si metoda de obtinere
EPO	-			
USPTO	1	3.03.2021	Michel W. Barsoum, Mihaela Florea, Stefan Neatu	Water Splitting Using Ti-oxycarbides

Brevete acordate

	Nr.propuneri brevete	Anul înregistrării	Autorul/Autorii	Numele propunerii de brevet
OSIM	1.	A 2017 00615 Hotararea Nr. 4.2/41 din 30.03.2021	Feder Marcel, Diamandescu Lucian Constantin, Cernea Marin, Sterian Gheorghe, Dumitrescu Iuliana	Procedeu de obtinere a unui material compozit bioxid de titan dopat cu fier si azot/oxid de grafena redus, cu activitate fotocatalitica extinsa in domeniul vizibil

	2.	A 2019 00745 Hotararea Nr. 4.2/31 din 30.03.2021	Ivan Ion, Aldica Gheorghe Virgil, Enculescu Monica, Miu Lucică, Ionescu Alina- Marinela, Crisan Ioan Adrian	Acoperiri supraconductoare de $YBa_2Cu_3O_{7-x}$ cu centri de fixare artificiali cu structura mixta, si procedeu de obtinere
	3.	U 2019 0027 Hotararea Nr. 4.3/21 din 28.05.2021	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
	4.	A 2019 00789 Hotararea Nr. 4.2/59 din 28.05.2021	Evanghelidis Alexandru- Ionut, Enculescu Maria- Monica, Enculescu Ionut- Marius, Matei Elena, Preda Nicoleta Roxana, Diculescu Victor Constantin, Florica Camelia-Florina, Costas Liliana Andreea, Beregoi Mihaela	Substrat microstructurat pentru masuratori de spectroscopie de rezonanta plasmonica de suprafata (SPR) si procedeu de obtinere al acestuia
	5.	A 2015 00748 Hotararea Nr. 4.3/179 din 30.06.2021	Aldica Gheorghe Virgil, Burdusel Mihail, Badica Petre	Procedeu de obtinere a unui material supraconductor prelucrabil mecanic
	6.	A 2016 00483 Hotararea Nr. 4.2/94 din 30.07.2021	Predoi Daniela, Ciobanu Steluta Carmen, Popa Cristina-Liana, Iconaru Simona-Liliana	Procedeu de obtinere a hidroxiapatitei dopate cu zinc in matrice de collagen
	7.	A 2017 00623 Hotararea Nr. 4.2/113 din 30.09.2021	Secu Mihail, Secu Elisabeta Corina	Procedeu de preparare a luminoforului $LaOCl$ dopat cu pamanturi rare
	8.	A 2017 00686 Hotararea Nr. 4.2/136 din 30.09.2021	Comanescu Cezar Catalin, Palade Petru, Kuncser Andrei Cristian, Plapcianu Carmen Gabriela	Material magnetic pe baza de nanoparticule de nitrura de fier ordonata cu structura martensitica, si procedeu de obtinere a acestuia
	9.	A 2019 00516 Hotararea Nr. 4.2/146 din 30.09.2021	Manta Corina-Mihaela, Samohvalov Dumitru, Gherca Daniel, Baibarac Mihaela, Lungan Maria- Andreea, 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

4.4. Structura de personal:

Personal CD (Nr.)	Anul 2021
Total personal	298
Total personal CD	226
Total personal cu studii superioare	211
Total personal cu doctorat	154
Total personal doctoranzi	34

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

Nr.	Nume și prenume	Grad	Funcția	Echivalent normă întreagă 2019	Anul angajării	Nr. Ore/2019
1	ABRAMIUC (STOFLEA) LAURA	CS		0,9	2012	1554
2	ALDEA ANCA	ACS		0,72	2017	1254
3	AMARANDE LUMINITA	CS III		0.0.88	1986	1532
4	APOSTOL NICOLETA	CS II		0,41	2006	710
5	BADICA PETRE	CS I		0.15	1996	263
6	BAIBARAC MIHAELA	CS I	Sef lab.	0.39	1995	1662
7	BALESCU (TRINCA) LILIANA MARINELA	CS		0.29	2011	500
8	BANCIU DOINA	EC		0.83	2015	904
9	BANCIU GABRIEL MARIAN	CS I		0.99	1989	1731
10	BARSAN ANCUTA	CSIII		0.9	2005	1559
11	BARTHA (VALSANGIACOM) MARIA CRISTINA	CS		0.8	2002	1381
12	BESLEAGA CRISTINA	CSIII		0.26	2012	442
13	BOCIRNEA AMELIA ELENA	ACS		0.17	2013	288
14	BOGDAN IULIA	ACS		0.23	2018	403
15	BONI(IBANESCU) ANDRA GEORGIANA	CSIII		0.36	2010	630
16	BORCA BOGDANA-LENUTA	CSIII		0.58	2015	1002
17	BOTEA MIHAELA	CS		0.76	2012	11322
18	BRATU CRISTINA	EC		1	2006	1736
19	BREAZU CARMEN STELIANA	CS		0.76	2012	1326
20	BUCUR CRISTINA IOANA	CS		0.6	2006	1036
21	BULAT STEFAN	IDT.		0.88	2014	1523
22	BURDUSEL MIHAIL	CS		0.63	2011	1089
23	CERNEA MARIN	CS I		0.98	2000	1696
24	CHIOIBASU MARIAN	TEHN.I		0.75	2007	1300
25	CHIRITOI MIHAELA	EC		0.61	2005	1053
26	CIOANGHER MARIUS CRISTIAN	CS		0.9	2001	1556
27	CIOBOTARU CONSTANTIN	CS		0.97	2012	1691
28	CIOBOTARU IULIA CORINA	CS		0.96	2010	1668
29	COMANESCU CEZAR CATALIN	CSIII		0.83	2011	1443
30	COSTAS ANDREEA	CS		0.5	2012	875
31	COSTESCU MARIA RUXANDRA	CS III		0.81	2010	1407
32	COTARLAN SIMIONUC COSTEL	CSIII		0.81	2005	1401
33	CRISAN ALINA	CS II		0.53	2003	921
34	CRISAN IOAN ADRIAN	CS I		0.14	1987	234
35	CRISAN MIRELA	EC		0.58	2005	1009
36	CRISAN OVIDIU	CS I		0.12	1993	209
37	DAESCU MONICA ALEXANDRA	ACS		0.33	2013	572
38	DICULESCU VICTOR	CSI		0.07	2016	112
39	DINU ION VIOREL	CS III		0.83	2001	1439
40	DRAGOMIR RADU	ACS		0.75	2012	1293
41	DUMITRU VIOREL	CS		0.29	2017	508
42	ENACHE TEODOR	CSIII		0.48	2017	829
43	ENCULESCU MARIA MONICA	CS I		0.31	1996	539
44	EVANGHELIDIS ALEXANDRU	CSIII		0.77	2012	1328
45	FILIP LUCIAN DRAGOS	CS II		0.33	2010	565
46	FLOREA OVIDIU GABRIEL	ING		0.86	2014	1495
47	FLORESCU VIORICA	TEHN. II		0.98	1983	1696

48	FLORICA CAMELIA FLORINA	CSIII		0,17	2010	298
49	FRUMOSU (UNGUREANU) FLORICA	Expert achizitii		0,65	2004	1123
50	FLOREA MIHAELA	CS I		0,37	2017	641
51	GALATANU ANDREI	CS I		0,49	1994	842
52	GALATANU MAGDALENA	CS		0,71	2008	1240
53	GALCA CATALIN AURELIAN	CS I		0,38	2006	655
54	GANEA CONSTANTIN PAUL	CSIII		0,91	2007	1578
55	GASPAR DALMA	TEHN. II		0,99	1990	1720
56	GAVRILA ALEXANDRU	SUBING.		1	1979	1736
57	GEAMBASU CEZAR DRAGOS	TEHN I		0,99	2010	1722
58	GHICA CORNELIU	CS I	Sef lab.	0,42	1994	735
59	GHICA DANIELA	CS II		0,57	1998	994
60	GHITA IRINA SORINA	ACS		1,00	2008	1736
61	GRECULEASA(SANDU)SIMONA GABRIELA	CSIII		0,85	2010	1467
62	GRIGOROSCU MIHAI ALEXANDRU	ACS		0,82	2015	1414
63	HOLDEAN GILDA	TEHN. II		0,92	1988	1588
64	HRIB LUMINITA	CSIII		0,24	2012	421
65	HUSANU MARIUS ADRIAN	CS II		0,69	2006	1203
66	ICONARU SIMONA LILIANA	CS III		0,48	2010	841
67	ILIE MIRELA	CS		0,24	2012	418
68	ION ANTON	TEHN. I		0,75	1983	1302
69	IONESCU MARILENA ALINA	CS		0,15	2013	260
70	IUGA ALIN	CS III		0,84	1987	1464
71	IVAN ION	CS		0,42	2006	724
72	ISTRATE MARIAN	ACS		0,5	2016	861
73	IACOB NICUSOR	CSIII		0,55	2017	956
74	IVANOICA TEODOR	Prog		0,18	2019	78
75	JELEA ELENA	EC		0,88	1980	1455
76	JOITA ALEXANDRA CAMELIA	ACS		0,69	2012	1202
77	KUNCSEI ANDREI	CSIII		0,46	2012	792
78	KUNCSEI VICTOR	CS I	Sef lab.	0,28	1990	487
79	LAZANU SORINA	CS I		0,01	1984	7
80	LAZAR MARIN	SUBING.		0,39	2019	684
81	LECA AUREL	IDT 3		0,54	2011	937
82	LEONAT LUCIA	CSII		0,37	2016	641
83	LEPADATU ANA MARIA	CS III		0,01	2006	117
84	LOCOSCI CLAUDIU	ACS		0,02	2018	40
85	LOGOFATU CONSTANTIN	CS III		0,80	1993	1393
86	LORINCZI ADAM	CS II		0,77	1995	1337
87	LUNGU GEORGE ADRIAN	CSIII		0,93	2002	1616
88	LUTEA ION	TEHN. I		0,61	1985	1053
89	MARALOIU VALENTIN ADRIAN	ING.		0,58	2004	1002
90	UDRESCU(MATEA)ADELINA	ACS		0,48	2012	831
91	MATEI ELENA	CSI		0,51	2006	884
92	MERCIONIU IONEL	ACS		0,69	2004	1191
93	MICLEA CORNELIU FLORIN	CS I		0,98	1997	1696
94	MIHALACHE VALENTINA	CS III		0,89	2000	1536
95	MOLDOVEANU VALERIU	CS I	Sef lab.	0,69	1990	1205
96	NEATU STEFAN	CSII		0,23	2014	406
97	NEATU FLORENTINA	CSII		0,25	2017	441
98	NEDELCU LIVIU	CS II		0,72	2002	1253
99	NEGRILA CONSTANTIN CATALIN	CS III		0,77	2001	1334
100	NILA ANDREEA ALEXANDRA	ACS		0,34	2013	589
101	NITA MARIAN	CS III		0,98	1995	1709
102	NITESCU OVIDIU	ACS		0,39	2017	672
103	OSTAHIE BOGDAN	ACS		0,72	2010	1286
104	ONEA MELANIA	ACS		0,91	2016	1576
105	PALADE CATALIN	ACS		0,01	2010	10
106	PALADE PETRU	CS II		0,57	1995	994
107	PASUK IULIANA	CS III		0,29	2006	502
108	PINTILIE IOANA	CS I		0,21	1985	362
109	PLUGARU NECULAI	CS I		0,79	1983	1376
110	POLOSAN SILVIU	CS I		0,89	1993	1548
111	POPESCU ADRIAN TEODOR	TEHN II		1	1989	1736
112	POPESCU BOGDAN	CS		0,85	2002	1472
113	POPESCU DANA GEORGETA	CSIII		0,14	2010	248

114	POPESCU TRAIAN	CSIII		0,81	2009	1528
115	PREDA NICOLETA ROXANA	CS I		0,39	2000	669
116	PREDOII DANIELA	CS I		0,54	1994	935
117	RADU ROXANA	ACS		1	2008	1736
118	RADU CRISTIAN	ACS		0,76	2016	1310
119	RADULESCU CATALIN	TEHN. I		1	2006	1736
120	RADULESCU MARIA	TEHN. II		1	1981	1736
121	RASOGA OANA	CS III		0,64	2006	1110
122	RUIU GEORGE	TEHN		0,63	2006	1096
123	SAVA FLORINEL	CSII		0,91	1994	1585
124	SCHINTEIE GABRIEL	CSII		0,53	2001	921
125	SECU CORINA	CS III		0,90	1996	1566
126	SECU MIHAI	CS I		0,73	1992	1273
127	SIMA MARIAN	CS II		0,81	1983	1408
128	SIMANDAN IOSIF DANIEL	CS		0,76	2009	1327
129	SIMION CRISTIAN	CSIII		0,68	2005	1179
130	SLAV ADRIAN	CSIII		0,03	2002	56
131	SMARANDA ION	CS		0,34	2009	583
132	SOCOL MARCELA	CS II		0,79	2001	1374
133	STAN ELENA	TEHN II		0,76	1980	1326
134	SOFRONIE MIHAELA	CSIII		0,75	2000	1307
135	STAN GEORGE	CS II		0,37	2005	637
136	STANCIU ANDA ELENA	ACS		0,58	2014	1011
137	STANCIU STEFAN	ACS		0,78	2016	1528
138	STANCU VIORICA	CS III		0,77	2001	1528
139	STANCULESCU ANCA IOANA	CS I		0,94	2001	1634
140	STANOIU (TOMESCU) ADELINA	CS II		0,80	1983	1384
141	STAVARACHE IONEL	CS II		0,16	2003	28
142	STEFAN MARIANA	CS II		0,63	1991	1100
143	STOICU ALEXANDRU	TEHN. I		0,75	2011	1303
144	STOICU CORNELIA	TEHN. II		0,66	1981	1140
145	STROE (SCOCIOREANU) MALVINA SIMONA	CS		0,47	2008	811
146	STOICA SABIN	CSI		0,18	2016	311
147	TACHE CRISTIAN	ING.		1	2011	1736
148	TANCU ELENA	TEHN.I		0,75	2006	1292
149	TEODORESCU CRISTIAN-MIHAIL	CS I		0,47	1990	812
150	TOLEA FELICIA	CSIII		0,83	2001	1442
151	TOLEA MUGUREL	CS II		0,97	2001	1682
152	TOMA VASILICA	SUBING.		1	1986	1736
153	TOMULESCU ANDREI	ACS		0,23	2013	290
154	TRUPINA LUCIAN	CS III		1	1996	1736
155	TUDOR EUGEN PETRU	TEHN		0,78	2012	1351
156	VELEA ALIN	CSII		0,54	2007	930
157	VLAICU AUREL MIHAI	CS III		0,14	1992	238
158	VLAICU IOANA DORINA	ACS		0,81	2011	1406
159	ZGURA IRINA IONELA	CS II		0,24	2001	416

Nr.	Nume și prenume	Grad	Funcția	Echivalent normă întreagă 2020	Anul angajării	Nr. Ore/2020
1	ABRAMIUC(STOFLEA) LAURA	CS		0.42	2012	792
2	ALDEA ANCA	ACS		0.79	2017	1486
3	ALEXANDRU DINU ANDREI	ACS		0.26	2019	492
4	AMARANDE LUMINITA	CS III		0.88	1986	1765
5	APOSTOL NICOLETA	CS II		0.57	2006	1074
6	BADICA PETRE	CS I		0.34	1996	647
7	BAIBARAC MIHAELA	CS I	Sef lab.	0.38	1995	725
8	BANCIU GABRIEL MARIAN	CS I		0.93	1989	1867
9	BARSAN ANCUTA	CSIII		0.92	2005	1735
10	BARTHA (VALSANGIACOM) MARIA CRISTINA	CS		0.73	2002	1382
11	BARZA ALEXANDRU MARIUS	ACS		0.3	2018	560
12	BESLEAGA CRISTINA	CSIII		0.47	2012	950
13	BEREGOI MIHAELA	CS		0.78	2013	1562
14	BOCIRNEA AMELIA ELENA	ACS		0.36	2013	674

15	BONI(IBANESCU) ANDRA GEORGIANA	CSIII		0.47	2010	950
16	BORCAN ELENA LARISA	ACS		0.3	2018	560
17	BORCA BOGDANA-LENUTA	CSIII		0.33	2015	628
18	BOTEA MIHAELA	CS		0.82	2012	1649
19	BOTTA OANA-DACIANA	ACS		0.35	2019	699
20	BREAZU CARMEN STELIANA	CS		0,26	2012	484
21	BUCUR CRISTINA IOANA	CS		0.57	2006	1079
22	BULAT STEFAN	IDT.		0.56	2014	1053
23	BUNEA MIHAELA CRISTINA	ACS		0.19	2018	379
24	BURDUSEL MIHAIL	CSIII		0.49	2011	925
25	BURLANESCU TEODORA	ACS		0.05	2020	85
26	BURUIANA ANGEL	ACS		0.12	2019	221
27	CERCEL RADU	ACS		0.23	2018	435
28	CERNEA MARIN	CS I		0,91	2000	1720
29	CHIOIBASU MARIAN	TEHN.I		0.55	2007	1040
30	CHIRILA FLORENTINA CRISTINA	CSIII		0.19	2008	388
31	CHIRICA MARIA-IULIANA	ACS		0.25	2018	507
32	CIOANGHER MARIUS CRISTIAN	CS		0.92	2001	1844
33	CIOBOTARU CONSTANTIN	CS		0,99	2012	1876
34	CIOBOTARU IULIA CORINA	CS		0.79	2010	1491
35	CIOBANU STELUTA	CSIII		0,71	2013	1433
36	CIOCA EUGEN MIHAIL	IDT		0.44	2011	879
37	COJOCARU OVIDIU	ACS		0.07	2018	138
38	COMANESCU CEZAR CATALIN	CSIII		0.88	2011	1654
39	COSTAS ANDREEA	CS		0.97	2012	1827
40	COSTESCU MARIA RUXANDRA	CS III		0,67	2010	1264
41	COTARLAN SIMIONUC COSTEL	CSIII		0,79	2005	1487
42	CRISAN ALINA	CS II		0.58	2003	1103
43	CRISAN IOAN ADRIAN	CS I		0.07	1987	124
44	CRISAN DANIEL	CS		0.12	2018	250
45	CRISAN OVIDIU	CS I		0.36	1993	685
46	CRISTEA MIRELA	ACS		0.23	2018	442
47	CULEA NICOLAE LIVIU	TEHN		0.59	2011	1121
48	DAESCU MONICA ALEXANDRA	ACS		0,32	2013	598
49	DICULESCU VICTOR	CSI		0.78	2016	1476
50	DINU ION VIOREL	CS III		0.80	2001	1502
51	DOBRE DUMITRU MARIAN	TEHN		0.53	2010	1004
52	DOBRESCU GABRIEL	IDT3		0.55	2014	1033
53	DRAGOMIR RADU	ACS		0,85	2012	1596
54	DRAGU ANDREEA	ACS		0.07	2020	136
55	ENCULESCU MARIA MONICA	CS I		0.99	1996	1877
56	EVANGHELIDIS ALEXANDRU	CSIII		0,78	2012	1573
57	FILIP LUCIAN DRAGOS	CS II		0,61	2010	1216
58	FLOREA IOANA	TEHNII		0.52	1986	979
59	FLOREA OVIDIU GABRIEL	ING		0.99	2014	1867
60	FLORESCU VIORICA	TEHN. II		1	1983	1888
61	FRUMOSU (UNGUREANU) FLORICA	Expert achizitii		0.82	2004	1543
62	FLOREA MIHAELA	CS I		0,61	2017	1219
63	GALATANU ANDREI	CS I		0.2	1994	381
64	GALATANU MAGDALENA	CS		0.64	2008	1201
65	GALCA CATALIN AURELIAN	CS I		0.5	2006	936
66	GANEA CONSTANTIN PAUL	CSIII		0,71	2007	1340
67	GASPAR DALMA	TEHN. II		0,99	1990	1865
68	GEAMBASU CEZAR DRAGOS	TEHN I		0,93	2010	1764
69	GHEGOIU LILIANA	ACS		0.04	2019	73
70	GHICA CORNELIU	CS I	Sef lab.	0.7	1994	1322
71	GHICA DANIELA	CS II		0.92	1998	1746
72	GHITA IRINA SORINA	ACS		0.86	2008	1725
73	GRECULEASA(SANDU)SIMONA GABRIELA	CSIII		0,76	2010	1426
74	GRIGOROSCU MIHAI ALEXANDRU	ACS		0.91	2015	1712
75	HOGAS CRISTINEL	ING		0.54	2019	1024
76	HOLDEAN GILDA	TEHN. II		0.89	1988	1674
77	HRISTEA IOANA ADELA	ACS		0.2	2018	377
78	HUSANU MARIUS ADRIAN	CS II		0.62	2006	1172
79	IANCU ALEXANDRU CRISTI	ACS		0.92	2018	1728
80	ICONARU SIMONA LILIANA	CS III		0,67	2010	1345

81	IGHICEANU ADELINA	IDT3		0.42	2018	792
82	ILAS MONICA	ACS		0.19	2018	352
83	ION ANTON	TEHN. I		0.99	1983	1872
84	IUGA ALIN	CS III		0.44	1987	830
85	IVAN ALEX ROBERT	ACS		0.03	2020	48
86	IVAN ION	CS		0.39	2006	735
87	ISTRATE MARIAN	ACS		0.55	2016	1047
88	IACOBAN ALEXANDRA	ACS		0.04	2012	79
89	IACOB NICUSOR	CSIII		0.89	2017	1673
90	IGNAT –BARSAN MADALINA	CSII		0.17	2017	335
91	IOSIF MARIAN	ING		0.59	1984	1108
92	JOITA ALEXANDRA CAMELIA	ACS		0.77	2012	1446
93	KUNCSEI ANDREI	CSIII		0.74	2012	1398
94	KUNCSEI VICTOR	CS I	Sef lab.	0.23	1990	427
95	LAZANU SORINA	CS I		0.51	1984	964
96	LAZAR MARIN	SUBING.		0.6	2019	1201
97	LECA AUREL	IDT 3		0.78	2011	1471
98	LEONAT LUCIA	CSII		0.86	2016	1721
99	LEPADATU ANA MARIA	CS III		0, 1	2006	182
100	LOCOVEI CLAUDIU	ACS		0.28	2018	534
101	LOGOFATU CONSTANTIN	CS III		0.72	1993	1365
102	LORINCZI ADAM	CS II		0.76	1995	1437
103	LUNGU GEORGE ADRIAN	CSIII		0.72	2002	1354
104	LUTEA ION	TEHN. I		0.52	1985	975
105	MARALOIU VALENTIN ADRIAN	ING.		0.85	2004	1596
106	MATEI ELENA	CSI		0.88	2006	1667
107	MERCIONIU IONEL	ACS		0.61	2004	1149
108	MICLEA CORNELIU FLORIN	CS I		0.97	1997	1823
109	MIHAI MIHAI	ING		0.78	2015	1474
110	MIHALCEA CATALINA	ACS		0.14	2018	270
111	MIHALCEA GHEORGHE	TEHN		0.2	2009	378
112	MIHALACHE VALENTINA	CS III		0.98	2000	1842
113	MIHOCI MIHAI-IULIAN	TEHN		0.32	2016	612
114	MIREA(COMAN) ANCA	ACS		0.17	2018	334
115	MOLDOVEANU VALERIU	CS I	Sef lab.	1	1990	1888
116	NEATU STEFAN	CSII		0.21	2014	388
117	NEATU FLORENTINA	CSII		0.28	2017	531
118	NEDELICU LIVIU	CS II		0.65	2002	1220
119	NEGREA RALUCA FLORENTINA	CSIII		0.18		339
120	NEGRILA CONSTANTIN CATALIN	CS III		0.76	2001	1428
121	NICOLAEV ADELA	CSIII		0.24	2018	460
122	NILA ANDREEA ALEXANDRA	ACS		0.35	2013	656
123	NITA MARIAN	CS III		0.93	1995	1764
124	NITESCU ANDREI	ACS		0.05	2020	99
125	NITU VICTOR	TEHN		0.59	1986	1110
126	OSTAHIE BOGDAN	ACS		0.57	2010	1073
127	ONEA MELANIA	ACS		0.58	2016	1168
128	PALADE CATALIN	ACS		0.17	2010	321
129	PALADE PETRU	CS II		0.53	1995	1003
130	PASUK IULIANA	CS III		0.46	2006	931
131	PATRU ROXANA	CS		0.5	2018	1000
132	PENA ADRIAN	ACS		0.24	2018	460
133	PETRE GABRIELA	ACS		0.23	2018	425
134	PETRE MARIAN	TEHN II		0.08	2018	160
135	PINTILIE IOANA	CS I		0.29	1985	590
136	PINTILIE LUCIAN	CSI		0.05	1987	98
137	POLOSAN SILVIU	CS I		0.43	1993	866
138	POPESCU ADRIAN TEODOR	TEHN II		0.94	1989	1774
139	POPESCU BOGDAN	CS		0.86	2002	1623
140	POPESCU TRAIAN	CSIII		0.83	2009	1575
141	PREDAN NICOLETA ROXANA	CS I		0.80	2000	1453
142	PREDOI DANIELA	CS I		0.75	1994	1510
143	RADU ANDREEA	ACS		0.26	2018	482
144	RADU DANA	ACS		0.5	2018	946
145	RADU ROXANA	ACS		1	2008	1888
146	RADU CRISTIAN	ACS		0.60	2016	1138

147	RADULESCU ANDREEA	ACS		0.06	2019	127
148	RADULESCU CATALIN	TEHN. I		0.99	2006	1858
149	RADULESCU MARIA	TEHN. II		0.95	1981	1787
150	RASOGA OANA	CS III		0,27	2006	512
151	ROSTAS ARPAD MIHAI	CSIII		0.07	2018	129
152	RUIU GEORGE	TEHN		0.47	2006	879
153	RUSU DORIN	ACS		0.05	2015	107
154	SAVA FLORINEL	CSII		0.60	1994	1134
155	SCHINTEIE GABRIEL	CSII		0.67	2001	1269
156	SECU CORINA	CS III		0.88	1996	1670
157	SECU MIHAI	CS I		0.70	1992	1321
158	SERBAN ARIANA	ACS		0.08	2019	156
159	SERVENTU ANY CRISTINA	ACS		0.11	2020	208
160	SIMA MARIAN	CS II		0.87	1983	1635
161	SIMANDAN IOSIF DANIEL	CS		0.44	2009	838
162	SIMION CRISTIAN	CSIII		0.78	2005	1482
163	SIMION DAN CONSTANTIN	ACS		0.16	2019	321
164	SLAV ADRIAN	CSIII		0,13	2002	252
165	SMARANDA ION	CS		0,34	2009	642
166	SOARE PETRE	TEHN		0.74	2014	1406
167	SOCOL MARCELA	CS II		0.62	2001	1177
168	STAN ELENA	TEHN II		0,67	1980	1256
169	SOFRONIE MIHAELA	CSIII		0.9	2000	1705
170	STAN GEORGE	CS II		0.55	2005	1096
171	STANCIU ANDA ELENA	ACS		0.61	2014	1146
172	STANCIU STEFAN	ACS		0.85	2016	1603
173	STANCU MARIA	ING		0.75	2017	1407
174	STANCU VIORICA	CS III		0,57	2001	1139
175	STANCULESCU ANCA IOANA	CS I		0.6	2001	1125
176	STANOIU (TOMESCU) ADELINA	CS II		0.82	1983	1546
177	STAVARACHE IONEL	CS II		0.17	2003	316
178	STEFAN MARIANA	CS II		1	1991	1888
179	STOICU ALEXANDRU	TEHN. I		0.6	2011	1124
180	STINGESCU MARIA_LUIZA	ACS		0.23	2018	441
181	STOICU CORNELIA	TEHN. II		0,72	1981	1360
182	STROE(SCOCIOREANU)MALVINA SIMONA	CS		0.34	2008	642
183	STOICA SABIN	CSI		1	2016	1888
184	TACHE CRISTIAN	ING.		0.19	2011	350
185	TANCU ELENA	TEHN.I		0.44	2006	798
186	TEODORESCU CRISTIAN-MIHAIL	CS I		0.44	1990	840
187	TITE MARTIAL TEDDY	CSII		0.28	2018	554
188	TOLEA FELICIA	CSIII		0.4	2001	750
189	TOLEA MUGUREL	CS II		0.77	2001	1460
190	TOMA VASILICA	SUBING.		0.94	1986	1778
191	TOMULESCU ANDREI	ACS		0.28	2013	565
192	TONCIU IOANA	TEHN		0.51	1980	956
193	TRANDAFIR MIHAELA MIRELA	CSIII		0.09	2018	176
194	TRUPINA LUCIAN	CS III		0.98	1996	1841
195	UDRESCU (MATEA)ADELINA	ACS		0.33	2012	619
196	TUDOR EUGEN PETRU	TEHN		0,49	2012	927
197	VELEA ALIN	CSII		0,51	2007	959
198	VLAICU AUREL MIHAI	CS III		0.62	1992	1169
199	VLAICU IOANA DORINA	ACS		0,83	2011	1573
200	ZGURA IRINA IONELA	CS II		0.22	2001	414

Nr.	Nume și prenume	Grad	Funcția	Echivalent normă întreagă 2021	Anul angajării	Nr. Ore lucrate/2021
-----	-----------------	------	---------	--------------------------------	----------------	----------------------

1	Abramiuc Elena Laura	CS		0.35	2012	677
2	Aldea Anca	ACS		0.57	2017	1,089
3	Alexandru Dinu Andrei	ACS		0.86	2019	1,639
4	Amarande Luminita	CSIII		0.35	1986	660
5	Apostol Mariana	ACS		0.20	2006	379
6	Apostol Nicoleta Georgiana	CSII		0.40	2006	765
7	Badica Petre	CSI		0.38	1996	724
8	Baibarac Aneta Mihaela	CSI	Sef lab.	0.34	1995	648
9	Balescu Liliana	Cs		0.01	2011	17
10	Banciu Marian Gabriel	CSI		0.64	1989	1,223
11	Baragau Ioan Al.	ACS		0.63	2020	1,200
12	Bartha Cristina	CSIII		0.77	2002	1,468
13	Beregoi Mihaela	CS		0.32	2013	621
14	Besleaga Stan Cristina	CSII		0.25	2012	480
15	Birsan Ancuta	CSIII		0.92	2005	1,750
16	Bocirnea Amelia Elena	CS		0.54	2013	1,041
17	Boni Andra Georgiana	CSIII		0.43	2010	828
18	Borca Bogdana Lenuta	CSIII		0.91	2015	1,749
19	Borcan Elena Larisa	ACS		0.55	2018	1,051
20	Botea Ioana Mihaela	CS		0.54	2012	1,028
21	Botta Oana-Daciana	ACS		0.63	2019	1,210
22	Branco Ricardo	ACS		0.35	2018	661
23	Breazu Carmen Steliana	CS		0.40	2012	764
24	Bucur Cristina	CS		0.18	2006	352
25	Bulat Stefan	IDT		0.58	2014	1,109
26	Bunea Mihaela Cristina	ACS		0.38	2018	729
27	Burdusel Mihai	CSIII		0.31	2011	594
28	Burlanescu Teodora	ACS		0.28	2020	538
29	Buruiana Angel -Theodor	ACS		0.48	2019	913
30	Cercel Radu	ACS		0.24	2018	464
31	Cernea Marin	CSI		0.24	2000	452
32	Chioibasus Marin	Tehnician		0.94	2007	1,800
33	Chirila Florentina Cristina	CSIII		0.42	2008	803
34	Chivu Madalina	ACS		0.23	2021	444
35	Cioangher Marius	CS		0.50	2001	952
36	Ciobanu Steluta Carmen	CSIII		0.68	2013	1,302
37	Ciobotaru Constantin Claudiu	CSIII		0.50	2012	947
38	Ciobotaru Iulia Corina	CSIII		0.54	2010	1,029
39	Cioca Eugen Mihail	IDT		0.35	2011	664
40	Cojocaru Ovidiu	ACS		0.17	2018	318
41	Comanescu Cezar Catalin	CSIII		0.79	2011	1,515
42	Costas liliana Andreea	CSIII		0.31	2012	595
43	Costescu Maria-Ruxandra	CSII		0.55	2010	1,051
44	Cotirlan Simioniuc Costel	CSIII		0.66	2005	1,264
45	Crisan Alina	CSII		0.49	2003	944
46	Crisan Daniel	CS		0.04	2018	77
47	Crisan Ioan Adrian	CSI		0.31	1987	600
48	Crisan Ovidiu Alexandru	CSI		0.41	1993	778
49	Cristea Mirela	ACS		0.27	2018	516
50	Culea Nicolae Liviu	Tehnician		0.36	2011	685
51	Daescu Monica Alexandra	ACS		0.26	2013	491
52	Derbali Sarah	ACS		0.60	2021	1,154
53	Diculescu Victor Constantin	CSI		0.54	2016	1,024

54	Dinu Ion Viorel	CSIII		0.99	2001	1,900
55	Dobre Dumitru Marian	Tehnician		0.51	2010	979
56	Dobrescu Gabriel	IDT3		0.73	2014	1,394
57	Dragomir Radu	CS		0.78	2012	1,503
58	Enache Adrian	CSI		0.30	2017	571
59	Enculescu Maria Monica	CSI		0.56	1996	1,079
60	Evanghelidis Alexandru Ionut	CSIII		0.34	2012	659
61	Filip Lucian Dragos	CSII		0.54	2010	1,034
62	Florea Ioana	Tehnician		0.41	1986	780
63	Florea Mihaela	CSI	Sef lab.	0.43	2017	825
64	Florea Ovidiu Gabriel	Ing		0.67	2014	1,289
65	Florescu Viorica	Tehnician		0.97	1983	1,860
66	Florica Cristina	ACS		0.23	2021	444
67	Frumosu Florica	ACS		0.76	2004	1,453
68	Galatanu Andrei	CSI		0.93	1994	1,777
69	Galatanu Magdalena	CS		0.90	2008	1,728
70	Galca Aurelian Catalin	CSI		0.68	2006	1,302
71	Gaspar Dalma	Tehnician		0.68	1990	1,292
72	Geambasu Cezar Dragos	Tehnician		0.44	2010	850
73	Gergely Victor	Tehnician		0.64	2019	1,223
74	Ghegoiu Liliana	ACS		0.32	2019	609
75	Ghica Corneliu	CSI	Sef lab.	0.19	1994	360
76	Ghica Daniela	CSII		0.14	1998	266
77	Ghinescu Stefan	ACS		0.21	2018	410
78	Ghita Irina Sorina	ACS		0.35	2008	664
79	Greculeasa Simona Gabriela	CSIII		0.57	2010	1,090
80	Grigoroscuta Mihai-Alexandru	ACS		0.80	2015	1,534
81	Hogas Cristinel	Ing		0.32	2019	611
82	Holdean Gilda	Tehnician		0.88	1988	1,680
83	Hrib Luminita	CSIII		0.08	2012	158
84	Husanu Marius Adrian	CSI(CSII)		0.34	2006	648
85	Iacob Nicusor	CSIII		0.62	2017	1,176
86	Iacoban Alexandra	ACS		0.38	2020	734
87	Iancu Alexandru - Cristi	ACS		0.85	2018	1,616
88	Ighigeanu Adelina	IDT 3		0.78	2018	1,492
89	Ignat -Barsan Madalina	CSI		0.39	2017	753
90	Ilas Monica	ACS		0.62	2018	1,187
91	Ilhae Assahsahi	ACS		0.38	2021	729
92	Ion Anton	Tehnician		0.81	1983	1,547
93	Ion Irina	ACS		0.89	2020	1,704
94	Ionescu Marinela Alina	CS		0.56	2013	1,080
95	Iosif Marian	ING		0.33	1984	633
96	Iota Miruna- Adriana	ACS		0.00	2020	6
97	Istrate Marian Cosmin	ACS		0.10	2016	197
98	Iuga Alin	CSIII		0.88	1987	1,681
99	Ivan Alex.Robert	ACS		0.61	2020	1,168
100	Ivan Ion	CSIII		0.58	2006	1,102
101	Joita Alexandra Camelia	ACS		0.36	2012	692
102	Kuncser Andrei Cristian	CSIII		0.21	2012	409
103	Kuncser Victor Eugen	CSI	Sef lab.	0.22	1990	427
104	Lazar Marian	Subing cert		0.41	2019	790
105	Leca Aurel	IDT 3		0.64	2011	1,230
106	Leonat Lucia	CSII		0.77	2016	1,466

107	Lepadatu Ana	CSII		0.33	2006	629
108	Locovei Claudiu	ACS		0.76	2018	1,458
109	Logofatu Constantin	CSIII		0.49	1993	944
110	Lorinzi Adam	CSII		0.48	1995	922
111	Lungu George Adrian	CSIII		0.50	2002	960
112	Lutea Ion	Tehnician		0.28	1985	530
113	Malaroiu Adrian Valentin	CSIII		0.50	2004	947
114	Matei Elena	CSI		0.32	2006	615
115	Mercioniu Ionel	CS		0.28	2004	532
116	Miclea Corneliu Florin	CSI		0.43	1997	819
117	Mihai Mihail	Ing		0.29	2015	555
118	Mihai Oana-Claudia	CS		0.09	2018	173
119	Mihalache Valentina	CSII		1.00	2000	1,912
120	Mihalcea Catalina	ACS		0.24	2018	463
121	Mihoci Mihai-Iulian	Tehnician		0.27	2016	512
122	Mirea(Coman) Anca	ACS		0.51	2018	966
123	Moldoveanu Valeriu	CSI	Sef lab.	0.95	1990	1,828
124	Neatu Florentina	(CSII) CSI		0.44	2017	842
125	Neatu Stefan	CSII		0.36	2014	685
126	Nedelcu Liviu	CSII		0.71	2002	1,363
127	Negrea Raluca Florentina	CSIII		0.23	2010	439
128	Negrila Constantin Catalin	CSII		0.86	2001	1,644
129	Nicolae Sabina Alexandra	ACS		0.00	2020	8
130	Nicolaev Adela	CSIII		0.64	2018	1,230
131	Nita Marian	CSIII		0.89	1995	1,696
132	Nitescu Andrei	ACS		0.50	2020	956
133	Nitu Victor Cristian	Tehnician		0.44	1986	849
134	Onea Melania Loredana	ACS		0.28	2016	534
135	Oprica Gabriela- Madalina	ACS		0.10	2020	186
136	Ostahie Bogdan	ACS		0.42	2010	809
137	Outman khouja	ACS		0.03	2021	64
138	Palade Catalin	ACS		0.25	2010	481
139	Palade Petru	CSII		0.47	1995	890
140	Pasuk Iuliana	CSIII		0.45	2006	868
141	Patru Roxana	CS		0.21	2018	403
142	Pena Adrian	ACS		0.65	2018	1,234
143	Petre Gabriela	ACS		0.38	2018	724
144	Pintilie Ioana	CSI		0.39	1985	755
145	Polosan Silviu Pavel	CSI	Sef lab.	0.50	1993	956
146	Popescu Adrian	Tehnician		0.96	1989	1,844
147	Popescu Bogdan Vasilica	CS		0.50	2002	957
148	Popescu Dana	CSIII		0.16	2010	310
149	Popesu Traian	CSIII		0.95	2009	1,816
150	Preda Nicoleta	CSI		0.79	2000	1,516
151	Predoi Daniela	CSI		0.48	1994	912
152	Radu Cristian	ACS		0.56	2016	1,068
153	Radu Dana	ACS		0.40	2018	773
154	Radu Roxana	CSIII		1.00	2008	1,904
155	Radulescu Andreea	ACS		0.26	2019	490
156	Radulescu Catalin	Tehnician		0.97	2006	1,856
157	Radulescu Maria	Tehnician		0.88	1981	1,678
158	Rasoga Oana	CSIII		0.50	2006	960
159	Rostas Arpad-Mihai	CSIII		0.13	2018	248

160	Ruiu George Daniel	ING		0.95	2006	1,818
161	Sanz Gomez Carolina	CSIII		0.23	2020	444
162	Sava Florinel	CSII		0.73	1994	1,404
163	Schinteie Gabriel Alexandru	CSII		0.50	2001	951
164	Secu Elisabeta Corina	CSIII		0.66	1996	1,260
165	Secu Mihail	CSI		0.55	1992	1,054
166	Sergentu Any Cristina	ACS		0.89	2020	1,698
167	Sima Marian	CSII		0.39	1983	742
168	Simandan Iosif Daniel	CS		0.53	2009	1,012
169	Simion Cristian	CSIII		0.88	2005	1,690
170	Slav Adrian	CSIII		0.20	2002	377
171	Smaranda Ion	CS		0.24	2009	465
172	Soare Petre	TEHN		0.31	2014	584
173	Socol Marcela	CSII		0.88	2001	1,688
174	Sofronie Mihaela	CSIII		0.28	2000	533
175	Stan George	CSI		0.73	2005	1,398
176	Stanciu Anda Elena	ACS		0.30	2014	582
177	Stanciu Stefan	ACS		0.69	2016	1,320
178	Stancu Maria	Ing		0.33	2017	636
179	Stancu Viorica	CSIII		0.23	2001	446
180	Stanculescu Anca Ioana	CSI		0.74	2001	1,424
181	Stanoiu Adelina	CSII		0.86	1983	1,636
182	Stavarache Ionel	CSII		0.26	2003	500
183	Stefan Mariana	CSII		0.17	1991	318
184	Stingescu Maria-Luiza	ACS		0.00	2018	1
185	Stoica Sabin	CSI		0.21	2016	394
186	Stoicu Cornelia	Tehnician		0.45	1981	856
187	Stoicu Marius	Tehnician		0.75	2011	1,426
188	Stroe Malvina Simona	CS		0.24	2008	467
189	Tache Cristian	Ing		0.43	2011	820
190	Tancu Elena	Tehnician		0.95	2006	1,810
191	Teodorescu Cristian	CSI	Sef lab.	0.22	1990	420
192	Tite Martial Teddy	CSII		0.61	2018	1,168
193	Tolea Felicia	CSII		0.32	2001	607
194	Tolea Mugurel	CSII		1.00	2001	1,911
195	Toma Vasilica	Subing cert		0.54	1986	1,040
196	Tomulescu Andrei Gabriel	ACS		0.22	2013	412
197	Tonciu Ioana	Tehnician		0.57	1980	1,084
198	Toulbe N Ghaya	ACS		0.29	2018	555
199	Trupina Lucian	CSIII		0.51	1996	972
200	Tudor Eugen	Tehnician		0.89	2012	1,705
201	Vaduva (Ilie) Mirela	ACS		0.30	2012	571
202	Velea Alin	CSII		0.75	2007	1,436
203	Vlaicu Aurel Mihai	CSIII		0.61	1992	1,169
204	Vlaicu Ioana Dorina	CSIII		0.76	2011	1,450
205	Zaki Mohamed Yassine	ACS		0.15	2021	278
206	Zgura Irina Ionela	CSII		0.52	2001	998

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

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

Nr.	Nume infrastructură/obiect/bază de date...	Data achiziției	Valoarea achiziției (lei)	Sursa finanțării	Valoarea finanțării infrastructurii din bugetul Progr. Nucleu	Nr. Ore-om de utilizare a infrastructurii pentru Programul-nucleu
1	Compresor heliu pentru PPMS	Invoice 82940/4306 / 03.08.2021	115,558.29	NUCLEU	115,558.29	1200
2	Vas Dewar prezurizat N lichid 50l	Invoice 13363412 / 23.09.2021	26,137.28	NUCLEU	26,137.28	1000
3	Moara cu bile vibrationala SPEX	RNX21 618 / 28.09.2021	57,120.00	NUCLEU	57,120.00	800
4	Masina de gheata Biobase FIM 20 (AMEX)	26587/22.10.2021	6,647.19	NUCLEU	6,647.19	600
5	LicenteFoxit Phantom PDF (1 buc)	Invoice IN21102739020 / 27.10.2021	924.18	NUCLEU	924.18	480
6	Moara cu role	0526 / 02.11.2021	16,399.39	NUCLEU + PCCF 18	13,110.12	360
7	Licente Igor Pro (21 buc)	Inv 211103-4042-85133 / 03.11.2021 (USD)	38,685.02	NUCLEU	38,685.02	360
8	Pompa vid preliminar EVO 50	1140904722 /09.11.2021	19,360.56	NUCLEU	19,360.56	320
9	Pompa ionica EVO 50	1140904722 /09.11.2021	21,140.20	NUCLEU	21,140.20	320
10	Licente Corel Draw Graphics Suite	Inv AKD-73692191949 / 09.11.2021	3,211.85	NUCLEU	3,211.85	320
11	Modul fotomultiplicator	2905/11.11.2021	17,195.50	NUCLEU	17,195.50	280
12	Vas Dewar Taylor	27003/16.11.2021	11,407.09	NUCLEU	11,407.09	210
13	Nisa chimica mobila	12633/16.11.2021	9,520.00	NUCLEU	9,520.00	210
14	Filafab Pro 350EX	2960/22.11.2021	17,700.06	NUCLEU	17,700.06	150
15	Termogravimetru	1123578/22.11.2021	127,698.90	NUCLEU + PTE9	126,721.90	150
16	Unitate sursa / masura Keithley 2401	21-112/22.11.2021	20,666.73	NUCLEU	20,666.73	120
17	Switch CISCO SG350X 50 porturi (7 buc)	0868/24.11.2021	44,982.00	NUCLEU	44,982.00	120
18	Licenta Chem Office (1 buc) C Ciubotaru 11223,84 lei se muta pe DUBNA L 60	1886/24.11.2021	16,902.66	NUCLEU + DUBNA	5,678.82	120
19	Pompa vid DUO 1.6 cu accesorii incluse	1323/24.11.2021	6,478.36	NUCLEU	6,478.36	120
20	Nisa Talasso MA902022	1123580/24.11.2021	43,601.60	NUCLEU	43,601.60	120
21	Switch CISCO SG350X 50	0867/24.11.2021	6,426.00	NUCLEU	6,426.00	120

	porturi (1 buc)					
22	Acid digestion vessel 45 ml	211781/25.11.2021	6,137.90	NUCLEU	6,137.90	120
23	Acid digestion vessel 125 ml	211781/25.11.2021	11,957.72	NUCLEU	11,957.72	100
24	Baie ultrasonare (pt nisa chimica Besleaga)	112583/25.11.2021	5,128.90	NUCLEU	5,128.90	100
25	Plita ceramica (pt nisa chimica Besleaga)	27270/25.11.2021	4,964.72	NUCLEU	4,964.72	100
26	Microcentrifuga Eppendorf MiniSpin	27259/25.11.2021	8,545.63	NUCLEU	8,545.63	100
27	Licente MATLAB	KI2100578/26.11.2021	58,893.10	NUCLEU	58,893.10	100
28	Presă hidraulică manuală 25 tone pt FTIR	3002/26.11.2021	24,734.15	NUCLEU	24,734.15	100
29	Cabinet uscare și stocare probe umiditate controlată	3001/26.11.2021	20,991.60	NUCLEU	20,991.60	100
30	Licente MATLAB (2 buc)	KI2100578/26.11.2021	23,557.24	NUCLEU	23,557.24	100
31	Licente Wolfram Mathematica 12.3 (4 buc)	Inv 206589/30.11.2021	56,402.69	NUCLEU	56,402.69	100
32	Sistem kiosk complet Elo	17/03.12.2021	8,800.05	NUCLEU	8,800.05	100
33	Cannon XA50 Camera video Profesional UHD	2723607/03.12.2021	17,998.00	NUCLEU	17,998.00	100
34	Rheometru modular	00300/03.12.2021	157,199.00	NUCLEU	157,199.00	100
35	Incubator cu CO2 255 L, camera de inox - culturi celulare	211852/07.12.2021	43,886.01	NUCLEU	43,886.01	100
36	Sistem prelucrare imagini Blackmagic DesignLink	18/07.12.2021	4,128.37	NUCLEU	4,128.37	100
Total echipamente cercetare			1,081,087.94		1,065,597.83	
1	Ultrabook ASUS ZENBOOK 14 UX425 Intel Core , 512 GB SSD Full HD (5 BUC)	BDT 3208199/28.10.2021	24,495.00	NUCLEU + TE 107	14,995.00	210
2	PC Office Diaxxa Intel (5 buc)	BDT 3207900/18.10.2021	17,995.00	NUCLEU	17,995.00	210
3	PC cu monitor și sistem operare Windows 10	00285/25.11.2021	10,115.00	NUCLEU	10,115.00	140
4	PC Office Diaxxa Intel (1 buc) C Ciubotaru	3222214/25.11.2021	3,599.00	NUCLEU	3,599.00	140
5	Desktop PC AMD Ryzen	18/07.12.2021	3,296.00	NUCLEU	3,296.00	100
Total calculatoare și echip periferice			59,500.00		50,000.00	

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

	Nr.	Tip
Proiecte internaționale	12	<i>ERC-H2020; M-ERA- NET, Quanteria</i>
Proiecte naționale	142	<i>PCE, PD, TE, PED, PTE, PFE, Sectorial</i>

6. Rezultate transferate în vederea aplicării :

Tip rezultat	Instituția beneficiară (nume instituție)	Efecte socio-economice la utilizator
<i>Tehnologie</i>	<i>Swarm European Services SRL</i>	<i>Diversificarea producției</i>

Contractul de prestări servicii de cercetare cu Swarm European Services SRL a fost încheiat în august 2021 pe o perioadă de 2 ani, pentru o sumă de 200,000 USD.

Au fost efectuate mai multe servicii de cercetare către parteneri din mediul academic și privat.

Nr. ctr./Fact.	Beneficiar	Val. Contract cu TVA	Responsabil ctr.	Denumire	Fact. cu TVA	Incasat (OP/ data)
Ctr. 1139/18.07.2014 (CW245056/2014)	S.C. ZENTIVA S.A.		Dr. George Stan	Difracție de raze X (XRD)		
Com.3500010160/ 06.11.2018						
Com.3500035316/ 26.11.2019		454.03				
Ctr.1856/1680/ 26.08.2020	SC ZENTIVA SA					
F1/08.01.2021					1,263.40	18.02.2021 BCR
F.12/23.03.2021		15,000.00			1,267.27	05.05.2021 BCR
F.13/26.03.2021					1,767.71	05.05.2021 BCR
F.20/05.05.2021					1,277.80	03.06.2021 BCR
F.25/09.06.2021					1,277.10	05.08.2021 BCR
F.29/29.06.2021					1,025.84	05.08.2021 BCR
F.37/02.08.2021					1,528.04	23.09.2021 BCR
F.42/06.09.2021					1,029.09	07.10.2021 BCR
F.48/14.10.2021					1,283.87	
F.54/22.11.2021					1,030.64	
F58/09.12.2021					1,283.82	
TOTAL:					14,034.58	
CAMI COMEXIM	DESEURI					
F.5/03.02.2021					104.00	06.04.2021 BCR
F.6/16.02.2021					133.00	06.04.2021 BCR
F.11/15.03.2021					166.04	06.05.2021 BCR

F.24/09.06.2021					83.10	
F.41/19.08.2021					145.00	
F.55/23.11.2021					83.02	
CTR.280/22.01.2021	KIMBALL ELECTRONICS	3,490.18	KUNCSER ANDREI	ANALIZE SEM; EDX		
F.4/01.02.2021					3,490.18	09.03.2021 BCR
Ctr.39/12.01.2021	SIDE GRUP SRL	13,804.00	Enculescu Monica	Analize SEM,EDX		
F7/26.02.2021					13,804.00	03.03.2021 BCR
Ctr.78/19.01.2021	APEL LASER	10,000.00	AGACHI DUMITRA ???	Ctr.de cesiune		
F.10/04.03.2021					10,000.00	12.03.2021 BCR
Com.2/19.04.2021	APEL LASER	14,280.00	Pintilie Lucian	Senzor piroelectric		
F.16/20.04.2021					14,280.00	26.04.2021 BCR
Com.2021/1065/22.04.2021	UPB	2,231.25	Banciu Gabriel	Mas.antena		
F19/28.04.2021					2,231.25	
Ctr.1205/26.05.2021	MICROSIN SRL	1,785.00	BARTHA CRISTINA	Mas.tip DSC		
F.23/03.06.2021					1,785.00	
CTR.1220/27.05.2021	RENAULT COMMERCIAL	2,380.00	Enculescu Monica			
CTR.4621/31.05.2021	KLASS WAGEN	2,380.00	Enculescu Monica			
CTR.880/13.04.2021	MICROSIN SRL	7,023.98	Florea Mihaela	Difractie XRD		
F.26/15.06.2021					7,023.98	
Com.1362/29.06.2021	I.C.S.I.	3,500.00	Negrila Catalin	Analize chimice		
F.30/12.07.2021					3,500.00	28.07.2021 BCR
Com.5639/02.04.2021	SARA PHARM	293.19	Galatanu A.	Analiza particule		
F.32/15.07.2021					293.19	16.07.2021 BCR
Com.1158/18.05.2021	MICROSIN SRL	439.80	Galatanu A.	Dis.granulometrica		
F.33/15.07.2021					439.80	19.07.2021 BCR
CTR.1537/28.07.2021	SWARM EUROPEAN	1,017,973.60	Pintilie L.	Serv.cercetare		
F.36/02.08.2021					49,204.12	04.08.2021 BCR

F.49/28.10.2021					76,207.01	
Com.1616/16.08.2021	MICROSIN SRL	1,315.19	Galatanu A.	Dis.granulometrica		
F.38/17.08.2021					1,315.19	18.08.2021
Com.1785/14.09.2021	MICROSIN SRL	294.41	Galatanu A.	Dis.granulometrica		
F.44/16.09.2021					294.41	
Com.22/23.08.2021	SITEX	3,959.60	Kuncser Victor	Caract.magnetica		
F.45/23.09.2021					3,959.60	
Com:P086R-20-2021-09-05-INF	HPS SRL	1,335.67	Galatanu A.	Mas.expansiune		
F.52/08.11.2021					1,335.67	
Com.2/17.08.2021	MICROSIN	3,675.00	Florea Mihaela	Anal.acid alfa lipoi		
F.43/09.09.2021					3,675.00	
Ctr.1919/04.11.2021	Univ. Alexandru Ioan Cuza	9,004.40	Husanu Marius	Cluster HPC		
F.53/17.11.2021					9,004.40	
TOTAL:					202,556.96	

val.cu
TVA
1,114,619.30

val.cu
TVA
216,591.54

TOTAL:

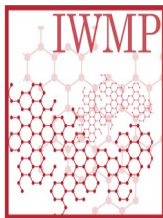
CONTRACTE IN VALUTA (Euro)

	Nr. ctr./Fact.	Beneficiar	Val. Contract cu TVA	Responsabil ctr.	fact. cu TVA	Incasat (OP/ data)
1	Com.1752/08.09.2021	IMT LJUBLIANA	465.60	Galatanu Andrei		
	F.326/18.10.2021				465.60	26.10.2021 BCR
2	Com. GSI ARIES	ARIES	40,000.00	Galatanu Andrei	40,000.00	07.12.2021 BCR
	Inv 327/11.11.2021					
	TOTAL:				40,465.60	

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

A fost organizata a 6-a editie a IWMP.

First Announcement



6th edition of the INTERNATIONAL WORKSHOP OF MATERIALS PHYSICS

14-16 of September 2021

The National Institute of Materials Physics (NIMP) announces the organization of the 6th edition of the International Workshop of Materials Physics (IWMP). The topic for 2021 edition is dedicated to ferroelectric and multiferroic materials, with special emphasis on thin films, multilayers, super-lattices and nano-objects. Aspects related to modeling, fabrication, characterization and potential applications will be presented and discussed.

Similar to the first five editions, the 6th 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.

Workshop Program

14 of September

9:00 – 9:10 Opening

9:10-9:50: Liliana Mitoseriu: **Scale-dependent properties in BaTiO₃ ceramics with structural instability**

9:50-10:30: Antonio Casares ([on-line](#)): **Multi-Modal-Correlative Microscopy** (sponsor presentation, Zeiss)

10:30-11:10: Maryline Guilloux-Viry ([on-line](#)): **Niobates Ferroelectric Thin Films: i/ Growth and Characterization of Perovskite and TTB Phases in the K-Na-Nb-O System; ii/ Potential of Application in High Frequency Miniature Tunable Devices**

11:10 – 11:30 coffee break

11:30-12:10: Michael Springborg: **Shapes (of) Matter**

12:10-12:50: Ibrahim Burc Misirlioglu ([on-line](#)): **Interface limited stability of ferroelectricity in thin film heterostructures: Electrostatic interactions, elasticity effects and phase coexistence**

12:50-13:30: Jorge Iniguez: **Optimizing steady-state negative capacitance**

13:30 – 14:30 lunch

14:30-15:10: Josep Fontcuberta: **Electron transport and plasmonic response of metallic oxides**

15:10-15:50: Valerie Demange: **Oxide nanosheets as seed layers for epitaxial growth of complex oxides**

15:50-16:30: Brian Rodriguez: **AFM tip-induced strain effects in BiFeO₃ films: from structural phase changes to polarization switching and nanofabrication**

16:30 – 16:45 coffee break

16:45-17:25: Marty Gregg ([on-line](#)): **Conducting Ferroelectric Domain Walls: Fundamentals of Transport and Device Opportunities**

17:25-18:05: Alexei Gruverman ([on-line](#)): **Unconventional Dynamics of Domain Walls in Uniaxial Ferroelectric Lead Germanate**

19:15 dinner

15 of September

9:00-9:40: Marin Alexe: **Incommensurate spin crystal phases in ferromagnetic and ferroelectrics**

9:40-10:20: Brahim Dkhil: **Playing with domains in ferroelectric polymers and hidden states in relaxors for neuromorphic computing**

10:20-11:00: Gustau Catalán: **Switching dynamics and “giant” electrocooling effect of antiferroelectric PbZrO₃.**

11:00 – 11:20 coffee break

11:20-12:00: Vincent Garcia: **Controlling antiferromagnetic textures in BiFeO₃ multiferroic thin films**

12:00-12:40: Nathalie Jedrecy ([on-line](#)): **Electro- and magneto- resistance in perovskite-based multiferroic junctions**

12:40-13:20: Pavlo Zubko ([on-line](#)): **Domains and lattice curvature in ferroelectric superlattices and supercrystals**

13:20 – 14:30 lunch

14:30-15:10 Torsten Granzow: **Anomalous photovoltaic effect in low-leakage solution-deposited BiFeO₃ films: Influence of doping and substrate stress**

15:10-15:50: Igor Stolichnov: **Switching in HfO₂-based ferroelectrics: an insight from nanoscopic analysis**

15:50-16:30: Marie-Helen Chambrier: **Ferroelectric state in a α -Ln₂WO₆ polymorphes stabilized in thin film**

16:30 – 16:45 coffee break

16:45-17:25: Gregory S. Rohrer ([on-line](#)): **High Throughput Studies of Metal Oxide Water Splitting Catalysts for the Development of Structure-Property Relations**

17:25-18:05: Eric L. Altman ([on-line](#)): **Coupling Elastic, Electrostatic and Magnetic Responses in Transition Metal Silicate Monolayers**

19:15 dinner

16 of September

9:00-9:40: Nick Barrett: **Interface chemistry, oxygen vacancies, charge injection and polarization stability in ferroelectric hafnia-based films for non-volatile memories**

9:40-10:20: Uwe Schroeder: **Stabilization of the Ferroelectric Phase in Doped Hafnium Oxide Films: Influence of Dopants and Oxygen Vacancies**

10:20-11:00: Athanasios Dimoulas ([on-line](#)): **Scaling of HZO ferroelectric in Ge MFS for low power FTJ**

11:00 – 11:20 coffee break

11:20-12:00: Bertrand Vilquin: **Nanostructuration effect on the wake-up effect of $\text{Hf}_{0.5}\text{Zr}_{0.5}\text{O}_2$ capacitor**

12:00-12:20: Cristian Mihail Teodorescu: **Charge accumulation, conduction band filling and ferroicity**

12:20-12:40: Georgia Boni: **Dynamic dielectric characterization of ferroelectric capacitors- Evidencing negative capacitance**

12:40-13:00: Leontin Padurariu: **Dynamic Finite Element Method for describing complex dielectric properties in ferroelectric-based composites**

13:00-13:20: Marius Husanu: **Ferroelectricity and rhombohedral distortion in the electronic band structure of strained PbZrTiO_3**

13:20 – 14:30 lunch



Seeing beyond

Workshopul a fost un eveniment hybrid, cu prezentari on-line dar si la locatia din Magurele a INCDFM. Mai jos sunt cateva imagini de la eveniment.





8. Aprecieri asupra derulării programului și propuneri:

Derularea normală a programului Nucleu în anul 2021 a fost perturbată puternic de următorii factori:

- Reducerea arbitrară a fondurilor pentru Programe Nucleu în anul 2021, ceea ce a dus la alocări mai mici față de 2019, și mult mai mici față de sumele care se cuveneau de drept conform legislației în vigoare și punctajului de la evaluare.

- Limitarea arbitrară a veniturilor salariale în cadrul Programelor Nucleu, care au devenit mult mai mici față de veniturile salariale în proiecte PN3. Având în vedere că, în lipsa competițiilor de proiecte în cadrul PN3, precum și numărul redus de proiecte finanțate în cadrul PN3 (cu bugete oricum insuficiente pentru a acoperi norme întregi la cercetători), mare parte din personal a fost finanțat din Nucleu, limitarea veniturilor a dus la complicații inutile în plata salariilor conform actelor normative în vigoare (CCM, CIM).

- Pandemia COVID-19 și măsurile luate pentru combaterea ei au dus la perturbarea activității de cercetare experimentală, ducând la anularea unor stagii de lucru și la reprogramarea multor experimente, cu impact asupra productivității științifice.

În ciuda acestor impedimente, unele subiective (vezi limitările arbitrare de fonduri și salarii amintite mai sus), altele obiective (pandemia COVID-19), rezultatele Programului Nucleu pentru anul 2021 sunt foarte bune, indicatorii și obiectivele fiind îndepliniți/îndeplinite în proporție de peste 80 %, deși mai este încă un an de desfasurare.

Merită punctate câteva rezultate deosebite:

- Cercetările și rezultatele preliminare obținute în cadrul programului Nucleu au fundamentat și soluții tehnice pentru problemele ridicate de firme private, acestea fiind valorificate sub forma de contracte subsidiare în cadrul celor două proiecte de tip POC-G în derulare în INCDFM. Au fost încheiate 17 contracte subsidiare.

- Este remarcabil numărul mare de lucrări publicate în jurnale cu factor mare de impact (quartila Q1). Circa 50 % din lucrările publicate sunt cu colaboratori din țară sau străinătate, ceea ce subliniază vizibilitatea INCDFM ca instituție de cercetare de elită din România, precum și calitatea cercetării care se desfășoară în INCDFM.

Propuneri pentru îmbunătățirea derulării programului Nucleu:

- Transformarea programului Nucleu într-un program real multianual, extins pe durata unui ciclu al Strategiei Naționale CDI și al Programului Cadru al UE.

- Finanțarea să fie deschisă imediat ce începe noul an, pentru a se evita intrarea în incapacitate de plată a institutelor naționale. Merită subliniat faptul că, în lipsa unor competiții periodice în cadrul Programului Național CDI, programul Nucleu este singura sursă de finanțare decentă a INCDFM-urilor. În lipsa acestuia cresc riscurile pierderii resursei umane și al deteriorării infrastructurii.

- Revenirea la o finanțare Nucleu conform legislației în vigoare.

- Finanțarea Programului Nucleu să țină cont și de rezultatele prezentate în raportul pentru anul anterior.

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

