

Contractor: INCDFM

Cod fiscal: 9068280

PROPUNERE PROIECT

Denumirea programului nucleu : Cercetari teoretice si experimentale in domeniul materialelor multifunctionale avansate pentru competitivitate economica si dezvoltare durabila (TEXMAV)

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

Tipul activitatii de cercetare – dezvoltare, inovare si demonstrare* : cercetare fundamentala si industriala

1. INFORMATII GENERALE **:

1.1. Titlul proiectului : Cercetari teoretice si experimentale la frontiera cunoasterii in fizica starii condensate si al materialelor multifunctionale cu impact aplicativ in domenii de inalta tehnologie si stiintele vietii.

1.2. Cuvinte cheie : materiale avansate, dielectrice, materiale magnetice, feroelectrice, semiconductori, supraconductori, nanomateriale, heterostructuri, nanocompozite, straturi subtiri, ceramici, senzori, biomateriale, biocompatibil

1.3. Date privind responsabilul de proiect:

(Se va anexa Curriculum vitae)

Nume, prenume: Pintilie Lucian

Cod numeric personal: 1590930400507

Titlul stiintific: Doctor in Fizica, CS1

Funcția: Director Stiintific

Telefon: 0213690185

Fax: 0213690177

E-mail: pintilie@infim.ro

Principalele realizări proprii și experiență din domeniul tematicii oferite:

- managementul cercetării, director si responsabil de proiecte nationale si internationale
- expert in caracterizarea materialelor semiconductoare si feroelectrice
- dezvoltare de aplicatii (detectori IR, dispozitive microelectronice, memorii)
- mai mult de 200 de publicatii, din care 198 in jurnale cu factor de impact, peste 2700 de citari (fara auto-citari), factor Hirsch 29

Conform CV anexat

*) Se menționează tipul/tipurile de cercetare – dezvoltare, inovare si demonstrare in conformitate cu Regulamentul UE nr. 651/2014 al Comisiei de declarare a anumitor categorii de ajutoare compatibile cu piața internă, in aplicarea art. 107 si 108 din Tratat (www.renascce.eu/documente/Exceptari_2014_ro_863ro.pdf)

**) Pentru cazurile in care spațiul alocat răspunsurilor nu este suficient, se pot anexa pagini separate.

2. INFORMATII ȘTIINȚIFICE / TEHNICE DESPRE PROIECT

2.1. Prezentarea pe scurt proiectului, cu menționarea Țintelor propuse a fi atinse prin implementarea proiectului :

Proiectul este conceput pentru realizarea obiectivelor din strategia de dezvoltare a INCDFM pentru perioada 2019-2022. Proiectul își propune să consolideze poziția INCDFM de organizație de cercetare de elită la nivel național și internațional în domeniul fizicii stării condensate, al științei materialelor și nanomaterialelor, să contribuie la consolidarea colaborărilor internaționale prin participarea în proiecte specifice sau prin implicarea în mari infrastructuri de cercetare, să contribuie la creșterea vizibilității prin publicatii și să întărească legăturile cu mediul privat prin dezvoltarea de aplicații și prin inovare.

Cercetările teoretice și experimentale din cadrul proiectului se pot grupa în 4 tematici principale, legate de cercetare fundamentală și de dezvoltarea de aplicații în strânsă legătură cu cele 4 specializări inteligente și 3 domenii de interes național specificate în Strategia Națională CDI (SNCDI) 2014-2020.

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 scară nano în materiale feroice, materiale 2D, fenomene optice neliniare, fizică 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 a 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 nisa 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 Sanătate)

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 Sanătate (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, sensoristică pentru automatizări și

monitorizarea diferitelor elemente cu impact asupra confortului si sigurantei personale, etc.), energie (cu aspecte legate de surse regenerabile de energie, stocare, transport si economisire) sau mediu (monitorizarea poluarii, eliminarea sau reciclarea poluantilor, eliminarea gazelor cu efect de sera si altele similare). In ceea ce priveste patrimoniul cultural, se au in vedere atat material care sa securizeze bunurile de patrimoniu cat si metode inovative de analiza a materialelor componente.

Tintele propuse a fi atinse la finalul proiectului (valori minime asumate):

- Studii si documentatii pentru noi tehnologii, echipamente si metode: 4
- Formule, retete, scheme, produse si tehnologii (la nivel de material, tehnologie sau demonstrator produs in laborator): 30
- Lucrari publicate in jurnale ISI: 500
- Cereri de brevet depuse: 30
- Aplicatii de proiecte: 25 (depinde si de ritmicitatea competitiei)
- Tineri cercetatori angajati in institut: 10
- Instituti colaboratoare din tara si strainatate: 30
- Cercetatori din strainatate care vin pentru stagii de lucru in INCDFM: 10
- Firme contactate pentru valorificarea rezultatelor: 30 (domenii: electronica; auto; IT; securitate; energetica; echipamente si automatizari; medicina; protectia mediului)
- Prezentari la conferinte: 300

2.2. Situația actuală:

Tema 1

Studiul *tranzitiilor de faze topologice si al starilor topologice ale materiei* a devenit un subiect central in fizica starii condensate. Starile si fazele topologice au fost initial prezise la nivel teoretic in anul 2006, caracterul lor paradigmatic fiind dat de faptul ca tranzitiile de faza asociate nu pot fi descrise satisfacator de teoria ruperii spontane de simetrie propusa de Landau. Eforturile experimentale au condus ulterior la identificarea fazelor topologice si a *efectului Hall cuantic de spin in heterojunctiuni 3D* de HgTe/(Hg,Cd)Te. Pentru acest material s-a observat ca variatia grosimii induce o tranzitie de faza topologica in jurul unei grosimi critice. Mai precis, sistemul trece de la un regim de izolator (conductanta tinde la zero) la un regim de efect Hall cuantic de spin in care apar stari de margine helicoidale care conduc curenti de spin. Daca sistemul are exact grosimea critica electronii prezinta un comportament relativist (Dirac) asemanator electronilor din grafena.

Tehnica cea mai directa pentru confirmarea si explorarea proprietatilor electronice ale *starilor protejate topologic* este spectroscopia de fotoelectroni cu rezolutie unghiulara (ARPES) care stabileste o relatie de echivalenta a intensitatii semnalului masurat si a unghiului de colectare a fotoelectronilor cu energia de legatura si vectorul de unda asociat acestor stari. Ca urmare trasarea structurii de benzi electronice este imediata, avand spre deosebire de spectroscopia de tunelare cu efect tunel si senzitivitate elementala datorita posibilitatii de a modifica energia fotonilor X incidenti la limitele de absorbtie ale elementelor in masuratori ARPES in conditii de rezonanta 2p-3d. Identificarea claselor de materiale care prezinta stari topologice si controlul acestora reprezinta directii de cercetare de frontiera cu impact major atat la nivel fundamental cat si al aplicatiilor in spintronica.

Materialele bidimensionale (2D) sunt printre cele mai studiate structuri in ultimul deceniu, in special datorita cercetarilor in *grafena*, un material 2D cu proprietati superlative si cu potential de aplicatii fara precedent. Pentru a dezvolta aplicatii pe baza de *dicalcogenuri ale metalelor de tranzitie - 2D TMD*, controlul productiei lor este extrem de important, devenind evidenta necesitatea unor tehnici scalabile. Putem imparti tehnicile actuale de obtinere a acestor materiale in doua clase: CVD (Chemical Vapor Deposition) prin care se produc monostraturi extinse de calitate superioara pe diferite substraturi si *tehnica de exfoliere in lichid* prin care se transforma cristalele masive stratificate in cantitati mari de nanostraturi (nanosheets).

Fosforena este unul din materialele 2D care a atras atentie incepand cu 2014. Cercetarile recente asupra fosforenei au condus la dezvoltarea de metode de fabricare si identificare rapida a numarului de straturi (layers), la tehnici de modulare a gap-ului in fosforena si la controlul proprietatilor mecanice. In particular s-a raportat o dependenta puternica a gap-ului in functie de numarul de straturi (acesta creste de la 0.3 la 1.5 eV prin trecerea de la bulk la dimensiune pur 2D - un singur strat). De asemenea s-au analizat spectrele Raman in functie de deformarea uniaxiala pe directiile zigzag si armchair specifice fosforenei. In acelasi context cercetari recente au evidentiat posibilitatea controlului gap-ului si stabilitatii prin *tehnici de functionalizare a fosforenei*.

Este de remarcat ca multe dintre materialele 2D descoperite in ultimul deceniu, precum cele din clasa hexagonala a grafenei, prezinta un tip de *conectivitate specifica retele bipartite* (RBP). Bipartitismul a fost introdus initial ca o proprietate matematica a unei retele formate din doua grupe de atomi A si B, cu proprietatea ca singurele procese de tunelare permise ale electronilor se manifesta doar intre atomii diferiti. Proprietatile RBP au fost initial utilizate pentru studiul magnetismului itinerant, exemplul clasic fiind cel al retelei Lieb dezvoltata in anul 1989 si care este un model pentru planele de CuO_2 din supraconductorii cuprati. Ca proprietati distincte ale unei retele bipartite mentionam simetria electron-gol, simetria spectrului electronic, si proprietati specifice ale functiilor de unda. *Studiul teoretic al efectelor de interferenta cuantica* in retele bipartite 2D este in acest context relevant si necesar.

Starile de margine au fost de asemenea observate sistematic in masuratorile de transport pentru sistemele 2D aflate in camp magnetic perpendicular, fiind responsabile pentru *cuantificarea transportului* si existenta platourilor Hall ale conductanta electrica. Se cunoaste ca starile de margine sunt robuste la dezordine si au *proprietatea de chiralitate* care este data de circulatia nenula a curentului electric pe marginile probei. Existenta starilor de margine intr-un sistem fizic 2D in absenta campului magnetic este definitorie pentru *regimul de izolator Chern*. Intrebarile deschise in domeniul starilor de margine nechirale se refera la posibila origine topologica a acestora si la controlul numarului de stari si al manipularii acestora.

Interesul pentru *heterostructurile bazate pe materiale feroelectrice* a crescut considerabil odata cu imbunatatirea tehnicilor de depunere in straturi subtiri epitaxiale cu interfete bine definite. Dispozitivele bazate pe aceste tipuri de structuri pot fi integrate in memorii feroelectrice cu access aleator (FeRAM), celule solare, porti logice etc. Un subiect de interes deosebit cu aplicatii in industria de calcul este *cresterea capacitatii de stocare a memoriilor non-volatile* sau cu acces aleator. In prezent, cresterea capacitatii de stocare este realizata prin marirea densitatii unitatilor de memorie, ceea ce necesita miniaturizarea continua a componentelor. Peste o anumita limita acest proces conduce insa la modificari nedorite ale proprietatilor fizice in materialele folosite. O alternativa viabila pentru cresterea capacitatii de stocare este cresterea starilor de memorie pe fiecare modul. In acest context s-a argumentat ca cele doua stari de echilibru definite in mod natural de directia polarizarii materialelor feroelectrice pot fi folosite ca modul de memorie binara si nu numai. Combinarea de materiale feroelectrice in heterostructuri cu diverse arhitecturi a condus la obtinerea de stari multiple de scriere. In acest fel poate fi eliminata (sau incetinita!) nevoia de miniaturizare si dificultatile asociate.

Un alt subiect de interes actual este *cresterea eficientei celulelor solare* pentru generarea de energie curata. Experimente efectuate recent pe celule solare bazate pe materiale perovskitice hibride au atins eficiente de conversie a puterii de 20%. Acest lucru a generat o adevarat cursa in lumea stiintifica pentru studierea si identificarea proprietatilor *materialelor perovskitice hibride* (hybrid perovskites - HP) de tipul $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{X}_x$ si felul in care se realizeaza interfata cu oxizi inorganici (ex. TiO_2). O metoda de crestere a eficientei celulelor solare cu HP poate fi depunerea lor pe materiale feroelectrice de tipul ABO_3 pentru a profita de proprietatile lor electronice (transport eficient de sarcina, polarizare etc.).

Rezultatele initiale ale calculelor numerice bazate pe metoda functionalului de densitate (DFT) au scos in evidenta un posibil avantaj in depunerea de HP pe un strat feroelectric subtire: bariera de potential dintre cele doua materiale poate fi controlata de directia polarizarii in substratul feroelectric. Acest lucru poate fi folosit in transportul departe de interfata a electronilor generati in stratul de HP.

Cele doua subiecte de cercetare (memorii si celule solare) descrise mai sus se pot inscrie intr-un set comun de probleme avand in vedere natura dispozitivelor. In ambele cazuri materiale feroelectrice sunt depuse pe metale sau materiale conductoare, izolatori sau sunt folosite drept substrat pentru perovskiti halizi. Astfel, studiul heterostructurilor folosite in aceste dispozitive implica investigarea proprietatilor materialelor bulk, a interfetelor dintre materialele componente, a efectelor legate de grosimea straturilor. Metodele teoretice ce pot fi aplicate se pot imparti in doua mari directii: analitice si numerice. Ruta analitica este in general o metoda flexibila ce poate fi folosita pentru a modela caracteristicile curent-tensiune sau capacitate-tensiune masurate pe heterostructuri cu materiale feroelectrice, sau pentru a studia interactiunea dintre doua straturi feroelectrice. Rezultatele obtinute au in general un caracter calitativ si pot conduce la stabilirea unor variatii macroscopice ale parametrilor studiati. In contrast cu metodele analitice, calculele numerice DFT modeleaza heterostructurile pornind de la structura atomica.

Heterostructurile bazate pe oxizi cristalizati in structura de perovskit constituie si un teren fertil pentru manifestarea unor efecte fascinante, de interes atat sub aspectul intelegerii fundamentale cat si sub cel aplicativ. *Gazul electronic bidimensional* evidentiat la interfata $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ dintre doi izolatori sau

doar la suprafața SrTiO_3 , *magnetorezistența colosală în semimetalul LaMnO_3* dopat cu Sr sau electrozistența gigant la interfața metal/feroelectric sunt doar câteva dintre acestea. Pe de altă parte, reducerea dimensiunilor în dispozitivele folosite în prezent în electronica reclamă înțelegerea mecanismelor noi care operează la scala sistemelor formate din doar câteva celule unitate. Deși în prezent materialele feroelectrice sunt deja folosite ca elemente în memorii nevolatile cu citire capacitivă, pentru a evita pasul suplimentar de rescriere a bit-ului de informație după fiecare accesare, scrierea rezistivă pare o perspectivă mult mai promițătoare în joncțiunile tunel feroelectrice.

În acest context este necesară și construirea unui model exhaustiv și intuitiv care să explice modul cum variază potențialul electric (curburile de bandă) într-un material feroelectric, precum și mecanismul electrodinamic de inducere a polarizării.

Multiferroicii sunt materiale atractive cu un real potențial de utilizare în generațiile viitoare de dispozitive electronice în diverse domenii de la electronica, la celule fotovoltaice, sau actuatori electrici, etc. Ingredientul esențial constă în interconectarea dintre ordinea electrică (feroelectrică) și cea magnetică (ferromagnetică). Cautarea acestor materiale este însă o provocare deoarece din punct de vedere fundamental feromagnetismul și feroelectricitatea se exclud reciproc. În plus, pentru o utilizare practică, cuplarea încrucișată a fazelor feroice trebuie să fie suficient de puternică și stabilă în condițiile ambientale (lucru neatins momentan). În acest context este de interes *studiul sistemelor hibride* bazate pe interacția între *molecule organice* cu proprietăți magnetice (molecule magnet) și *molecule polare* prezentând ordine de sarcină electrică. Alternativ, prezintă relevanță și sistemele hibride formate prin interacția la *interfața metal-organică* pentru studierea aceluiași tip de proprietăți. Designul adecvat al unui astfel de cuplaj pentru realizarea ordinii multiferroice depinde foarte mult de înțelegerea corectă a mecanismelor care operează în regiunea de contact dintre cele două tipuri de molecule și între molecule și substrat. Din punct de vedere experimental se folosesc diferite molecule de mărime și geometrie diferită cât și diferite substraturi metalice iar ca metode de investigare la scala nanometrică și de suprafață in-situ se folosesc în principal microscopia electronică și spectroscopia de fotoelectroni, dar și alte tehnici ex-situ.

Microscopia de forță electrostatică cu rezoluție unielectronică (e-EFM) este o tehnică foarte nouă propusă în 2016 și se bazează pe efectele interacțiilor electrostatice dintre proba investigată și apex-ul unui AFM care funcționează în regim de nanorezonator. Această tehnică permite investigarea individuală și non-invazivă a nanoparticulelor coloidale și a doturilor cuantice self-assembled. De asemenea, poate fi folosită cu succes și în citirea biturilor cuantice (qubits). Spre deosebire de tehnica e-EFM în care nanosistemul depus pe substrat este cel investigat, metoda SQDM presupune funcționalizarea unui tip de AFM cu un dot molecular care este folosit ca parte a instrumentului de detecție. Tehnica prezintă avantaje majore în cartografierea 3D a potențialelor electrostatice generate de un substrat. Ambele metode se bazează în mod esențial pe faptul că nano-structurile prezintă o structură discretă de nivele - echivalentul densității de stări din sistemele extinse. În acest caz tunelarea are loc în condiții rezonante, intensitatea semnalului este proporțională cu amplitudinea în acel punct a funcției de undă corespunzătoare nivelului pe care se face tunelarea.

Studiul *nanomagnetilor artificiali sau moleculari* plasați în vecinătatea unui nanorezonator este de mare actualitate dar din punct de vedere teoretic s-au făcut doar foarte puțini pași spre înțelegerea fenomenelor fizice. Un nanomagnet artificial poate fi plasat pe un nanofir sau pe o nanoconsolă (cantilever) al cărui capăt liber oscilează între doi electrozi sursă-drenă. În acest dispozitiv transportul prin moleculă este controlat de mișcarea mecanică a sistemului pe care este atașat în sensul variației coeficienților de hopping. Acest aranjament experimental este similar cu așa-numitul nanoshuttle și presupune o descriere teoretică adecvată a transportului dependent de timp în prezența mișcării nanomecanice.

O clasă largă de efecte și aplicații ale electrodinamicii cuantice se pot observa și studia mult mai bine în *sisteme zero-dimensionale 0D* (doturi cuantice) imersate în nanocavități decât în sisteme atomice (cold atoms). Este de remarcat că răcirea și localizarea/traparea sistemelor de atomi presupun tehnici sofisticate și costisitoare. În plus, cuplajul optic pentru un atom este o proprietate intrinsecă în timp ce în doturile cuantice cuplajul optic poate fi controlat prin intermediul funcțiilor de undă (anvelopă) ale electronului și golului care depind de geometrie, deformări, câmpuri aplicate etc. Complexitatea proceselor devine și mai ridicată prin folosirea a două semnale optice: un semnal continuu provenit de la laser de frecvență rezonant și un al doilea slab (probe signal). Modelarea teoretică a acestor procese este încă într-un stadiu incipient dar este de așteptat că ritmul accelerat în care se propun noi experimente să reclame noi dezvoltări teoretice.

Nanotuburile de carbon cu un singur perete (single-walled carbon nanotubes - SWNTs) sunt un exemplu marcant de nanomateriale unidimensionale (1D) ale caror aplicatii prezinta potential disruptiv. In functie de modificari in finele ale structurii atomice a (asa-numitii vectori de chiralitate) nanotuburile de carbon cu 1 perete devin sistematic dielectrice, metalice sau semiconductoare. Tehnicile CVD actuale (disponibile si in INCDFM) permit producerea de retele de SWNT aliniate care pot fi folosite ulterior ca tranzistori de radiofrecventa (RF) precum si in circuite digitale. Tranzistorul cu efect de camp (FET) cu un singur nanotub SW a fost de asemenea realizat experimental. Mai mult, regimul de transport quasi-balistic specific nanotuburilor promite sa depeaseasca performantele tehnologiilor de tip CMOS.

Domeniul de aplicatii ale nanotuburilor de carbon poate fi extins inca si mai mult la domeniile medicina si energie prin metode specifice de functionalizare. Modificarile non-covalente exploateaza natura hidrofoba a nanotuburilor in timp ce modificarile covalente genereaza legaturi chimice pe atomii de suprafata. Aceste modificari confera solubilitate in apa si produc functionalitati care permit legarea agentilor terapeutici si recunoasterea moleculara. *Materialele compozite bazate pe politrifetilamina si nanotuburi de carbon* cu mai multi pereti (MW-CNT) au fost folosite ca materiale active pentru catodii bateriilor cu ioni de litium.

In ultimul timp exista o crestere considerabila a interesului fata de aplicatiile in care *nanofluorurile dopate cu pamanturi rare* (Er, Ho, Tm) etc.) care prezinta fenomenul de up-conversie. Acest fenomen consta in conversia radiatiei infrarosii in domeniul vizibil si deschide noi alternative in ceea ce priveste markerii fluorescenti pentru bioimagistica si biodetectie atat in vitro si in vivo sau ca agenti antimicrobieni. Comparativ cu markerii cu coloranti aceste materiale prezinta mai multe avantaje, printre care stabilitatea chimica superioara, toxicitatea mai scazuta, si un raport semnal/zgomot bun. Nanoparticulele magnetice sunt de asemenea nanomateriale cu dimensiuni controlate ce pot fi manipulate din exterior si care cresc contrastul imagisticii de rezonanta magnetica nucleara.

Studiul defectelor in structuri iradiate cu diferite tipuri de radiatii este foarte important pentru dezvoltarea de noi detectori si dispozitive electronice care lucreaza in conditii extreme cum ar fi spatiul cosmic, reactoare nucleare sau acceleratoare de particule. Un caz tipic este marele accelerator LHC de la CERN, care utilizeaza detectori de Si pentru monitorizarea traiectoriei si concentratiei diferitelor tipuri de particule generate in urma ciocnirilor hadron-hadron. In ultimii 20 de ani au fost intreprinse studii sistematice asupra defectelor induse de iradiere in detectori de Si, in special in cadrul colaborarilor CERN RD48 si RD50. Rezultatele obtinute au permis dezvoltarea de noi detectori prin inginerie de defecte, mult mai rezistenti la iradiere cu fluente mari (a se vedea pagina RD50 <https://rd50.web.cern.ch/rd50/> si publicatiile de acolo).

Tema 2

Aceasta cuprinde cateva directii de cercetare, dupa cum urmeaza:

-Proiectarea de materiale cu proprietati bine definite, [referinte T1-T16] prin utilizarea diverselor coduri de simulare este la ora actuala o metoda de mare interes in studiul materialelor avansate, avand in primul rand avantajul eliminarii costurilor materiale imense legate de metoda incercarilor experimentale succesive (sinteza-caracterizare-optimizare prin feed-back). Aceasta vizeaza stabilirea conexiunilor dintre structurile electronice, parametrii de material si proprietatile electrice, magnetice, optice, etc., dorite pentru acesta. Metodele numerice utilizate in cadrul acestui proiect sunt cele referitoare la analiza teoretica a structurii electronice a materialului pe baza Teoriei Functionale de Densitate (metode ab-initio tip DFT), respectiv metodele de analiza a elementelor finite aplicate in vederea rezolvarii ecuatiilor diferentiale atasate diverselor probleme de stabilitate energetica. In cazul stabilirii structurii electronice pe baza Teoriei Functionale de Densitate pot fi supuse studiului clase intregi de materiale, selectandu-se pentru experimente reale un numar limitat de sisteme care din punct de vedere teoretic ar putea duce la proprietati optimizate in raport cu o anumita aplicatie. Dezavantajul metodei consta in limitarea morfo-structurala a sistemelor investigate (puterea de calcul nu permite considerarea unor structuri cristaline oricat de complexe si in anumite cazuri nu pot fi luate in considerare morfologiile specifice ale sistemelor, de unde si limitarea privind studiul efectului de dimensiune si dimensionalitate precum si al interactiei dintre diverse faze). Clasele generale de sisteme supuse studiului structurii electronice prin metoda Teoriei Functionale de Densitate in proiectul de fata se refera la compusii intermetalici de tip Heusler cu particularitati electronice ce ii permit obtinerea de multifunctionalitati diverse, sistemelor semiconductoare diluate magnetic cu comportament de feromagnet functional si sistemelor supraconductoare in compusi cu structuri cristaline non-centrosimetrice. Privitor la utilizarea metodei

elementelor finite in problema de minimizarea energiei sistemului se propune a fi studiate teoretic si experimental legaturile dintre caracteristicile morfo-structurale si caracteristicile magnetice in sisteme de nanoparticule magnetice cu distributii de forme si dimensiuni precizate, studii ce implica atat dezvoltarea de algoritmi de evaluare numerica prin metoda elementelor finite a energiilor de anizotropie a nanoparticulelor cat si dezvoltarea de metodologii neconventionale de caracterizare a acestor distributii de forma si dimensiune in sisteme complexe nanometrice. Ca urmare, prin proiect se propune implementarea in premiera pe plan national a doua tehnici avansate de caracterizare morfostructurala a materialelor la nivel nanometric cu ajutorul microscopiei electronice de transmisie cat si implementarea unei metodologii de interpretare a figurilor complexe de poli obtinute prin difractie de raze X de inalta rezolutie la interfata filmelor subtiri metalice pe substraturi monocristaline semiconductoare care sa probeze formarea de texturi neconventionale. Se va avea de asemenea in vedere extinderea metodelor numerice micromagnetice in studiul fenomenelor de conductie electrica modulata de structurile de spin si reciproc, in studiul evolutiei structurilor de spin in sisteme nanometrice parcurse de curenti.

-Sinteza si caracterizarea de noi nanosisteme cu dimensionalitate redusa [referinte D1-D80] vizeaza inducerea de functionalitati suplimentare legate atat de dimensiunea nanometrica cat si de dimensionalitatea specifica, temele de cercetare vizand atat sistemele 0D (NP) cat si sistemele 2D (filme subtiri si multistraturi). In ambele cazuri se are in vedere utilizarea unor metode neconventionale de sinteza care sa confere sistemelor proprietati neastepate (electronice, magnetice, electrice, dielectrice si feroelectrice) si functionalitati diverse, urmand ca acestea din urma sa fie supuse unor investigatii complexe care sa permita intelegerea mecanismelor fundamentale necesare optimizarii sistemelor in raport cu aplicatii diverse.

In privinta **sistemelor 0D** se va avea in vedere investigarea proprietatilor si a mecanismelor asociate in nanostructuri spinelice de tipul CoFe_2O_4 obtinute prin chimie verde (green chemistry), sinteza de nanoparticule metalice incarcate pe suprafete feroelectrice si studiul reactivitatii acestor suprafete, formarea de nanoparticule simple sau cu structuri core-shell prin metode neconventionale care sa confere nanoparticulelor diverse proprietati ajustabile (catalitice, magnetice, chimice, etc.) studiul proprietatilor magnetice, optice si catalitice/fotocatalitice in nanoparticule de oxizi diluati magnetic (pure si dopate cu metale tranzitionale magnetice) obtinute prin diverse cai de procesare (sinteza hidrotermala, procesari de neechilibru, chimie soft, etc.).

In privinta **sistemelor 2D** (filme subtiri si multistraturi), interesul actual este de a se obtine noi cunostinte si de a se dezvolta noi aplicatii bazate pe astfel de sisteme de interes ridicat in industriile de inalta tehnologie (electronica, optoelectronica, telecomunicatii, spatiu si securitate, senzoriala, auto, etc.). Functionalitatile sistemelor 2D cresc substantial in arhitecturi complexe care sa duca la caracteristici imbunatatite derivate din diferite tipuri de cuplaje la interfete. Dintre materialele functionale ce formeaza fiecare film, in proiectul de fata se au in vedere, conform trendului international actual, cele cu proprietati semiconductoare, dielectrice/feroelectrice/multiferoice/ piroelectrice/piezoelectrice, magnetice si supraconductoare. Combinatiile organic/inorganic si sistemele de tip filme subtiri si multistraturi magneto-functionale, depuse pe substrat flexibil vor fi supuse de asemenea atentiei, impreuna cu optimizarea sintezei sistemelor 2D calcogenice, obtinute prin CVD.

- Sinteza si caracterizarea de materiale nanocompozite cu potential de aplicatii high-tech [referinte N1-N74]. Materialele nanocompozite reprezinta o clasa de materiale avansate alcatuite din cel putin doua faze morfostructurale, dintre care cel putin una este structurata la nivel nanometric (dimensiuni sub 100 nm) dupa una, doua sau trei dimensiuni. Conceptul acestor tipuri de materiale se bazeaza pe utilizarea de unitati constructive nanometrice care, imersate intr-o matrice de alta natura, sa duca la crearea unui ansamblu cu proprietati fizico-chimice (mecanice, electrice, magnetice, termice, optice, electrochimice, catalitice, etc.) noi sau imbunatatite in raport cu cele caracteristice materialelor componente. Desi materialele nanocompozite in sine nu reprezinta un element de noutate tehnologica absoluta, oamenii profitand de proprietatile acestora inca de la mijlocul secolului XX (si chiar anterior), intelegerea mecanismelor care stau la baza proprietatilor superioare ale acestora materiale este atat de interes fundamental cat si aplicativ. Fara indoiala, aceste eforturi se inscriu in tentativa de a fi create materiale noi, bazate pe exploatarea mecanismelor de interactie fizico-chimice la nivel nanometric intre fazele componente, de functionalitati diferite. Diferentele care se manifesta intre materialele nanocompozite si cele compozite conventionale au la baza suprafata specifica mare de interactie intre matrice si faza nanostructurata care poate consta din nanoparticule, folii subtiri (e.g. grafena) sau nanotuburi/nanofire. Aria totala a interfetei dintre matrice si faza nanostructurata este in general cu un ordin de marime mai

mare în cazul materialelor nanocompozite decât în cazul materialelor compozite convenționale. Din acest motiv, efectul fazei nanostructurate în modificarea proprietăților fizico-chimice ale materialului gazdă se poate face simțit încă de la valori reduse ale concentrației masice a fazei nanostructurate (0.5-5%). Proiectul propus se va concentra pe o serie de tipuri de materiale nanocompozite, de interes fundamental și aplicativ pentru proprietățile lor microstructurale, termice, electrice, fotoelectrice, magnetice, catalitice. Aceste tipuri de materiale au fost selectate având în vedere următoarele criterii: i. interesul fundamental și aplicativ precum și gradul de noutate la nivel național și internațional; ii. competența existentă în cadrul institutului; iii. disponibilitatea infrastructurii de cercetare care să permită sintetizarea și caracterizarea tipurilor de materialele selectate.

Domeniul materialelor autoreparabile este extrem de recent, fiind abordat abia în primul deceniu al secolului XXI. Având ca sursă de inspirație biomimetismul, cele mai studiate materiale sunt polimerii sau elastomerii, deși domeniul include o clasă largă de materiale precum metalele, materialele ceramice sau cimenturile. Mecanismul de autoreparare poate fi unul pur intrinsec sau poate include un stimul extern (lumina, variații de temperatură). În cadrul acestui proiect se urmărește obținerea și caracterizarea de compozite autoreparabile bazate pe nanotuburi de carbon cu un singur perete și polifurfuril metacrilat. În contextul progresului înregistrat în domeniu compozitelor pe baza de nanotuburi de carbon ca materiale autoreparabile, menționăm folosirea reacțiilor Diels-Alder pentru funcționalizarea nanotuburilor de carbon cu o-chinodimetan, raportată ca fiind folosită pentru prima dată în 2004 de către Delgado et al. [N1] Un dezavantaj al reacțiilor Diels-Alder îl constituie caracterul reversibil al aductului format în urma cicloadiției desfășurate la temperaturi scăzute [N2]. O soluție pentru depășirea acestui impediment o constituie blocarea cicloaductului cu un polimer, din a cărui structură face parte filodiena malein-imida [N3]. Un compus macromolecular folosit în acest scop este polifurfuril metacrilat obținut prin reacția de transesterificare în mediu alcalin a alcoolului furfurilic cu metil metacrilatul [N4]. În literatura de specialitate se preferă utilizarea PFMA în procesul de cicloadiție Diels-Alder (DA), deoarece acesta conduce la creșterea hidrofobicității sistemului [N5], îmbunătățind gradul de dispersie a nanoparticulelor. În cadrul acestor procese de autoreparare sunt considerate două aspecte importante, și anume: fluxul fizic de substanță (la nivel macro) la suprafață sau în apropierea locului în care s-a produs distrugerea (ruperea) și refacerea legăturilor chimice afectate (la nivel molecular). În procesele de refacere (reparare) participă activ, în egală măsură, atât molecule heterogene cât și regiunile de interfață care facilitează asamblarea moleculară sau formarea de noi legături covalente. Procesul de autoreparare este inițiat fie prin iradiere, fie chimic, prin intermediul interacțiilor de tip π - π , donor-acceptor, sau termic cu eliberare de factori reparatori, inițial încapsulați într-un polimer gazdă.

Compozitele metalo-ceramice sunt la ora actuală un subiect incipient la nivel mondial și aproape deloc abordat la nivel național. Realizarea unor materiale imbinând proprietățile termofizice foarte diferite ale metalelor și ceramicilor prezintă un potențial aplicativ ridicat pentru diverse domenii [N6-N8] dar tocmai aceste diferențe fac dificilă și realizarea compozitelor [N9]. În acest studiu vor fi explorate noi modalități de realizare a unor astfel de materiale, utilizând tehnici de sinterizare asistate și tehnici hibride de tip SHS [N10] (Self-propagating high-temperature synthesis) -SPS (spark plasma sintering) și SHS-MWS (microwave sintering) pentru a produce materiale noi cu proprietăți pre-determinate.

Un al doilea tip de materiale nanocompozite de interes pentru proprietățile lor termoelectrice ce vor fi abordate în cadrul proiectului sunt bazate pe skutteruditi dopați, pentru aplicații în domeniul de temperatură 400-800K. Skutteruditi sunt materiale cu proprietăți termoelectrice excelente, atingând în prezent randamente ridicate de conversie ale căldurii în electricitate. Calitatea unui astfel de material este guvernată de o mărime adimensională denumită “figura de merit”, $ZT = (S^2 \sigma T) / \kappa$. Cum mărimea care o determină sunt interconectate, o strategie de a obține valori ridicate ale ZT este de a micsora valorile conductivității termice (κ) și de a menține constante pe cele ale coeficientului Seebeck (S) și ale conductivității electrice (σ). Acest lucru poate fi obținut prin controlul gradului de dopaj, al tipului dopantului sau prin dispersarea unor nanoparticule la granițele de granițe ale materialului. Acest ultim caz este investigat în acest proiect. Unul din punctele majore de interes în dezvoltarea materialelor avansate îl constituie reducerea cantităților de material utilizate la un minim definit de funcționalitatea lor principală. Aceasta impune îndeplinirea celorlalte cerințe (în general structurale) prin îmbunătățirea substanțială a proprietăților unor componente incluse în compozite. Un exemplu tipic în acest sens este constituit de materialele metalice spongioase [N11]. Dezvoltarea de tehnologii pentru a înlocui metalul cu materiale compozite cu proprietăți mecanice și termo-fizice superioare păstrând avantajele unui material spongiu constituie și obiectivul acestui studiu, vizând dezvoltarea de materiale cu aplicații

diverse in domenii precum energie, materialelor biocompatibile [N12] sau catalizei [N13]. Abordarea propusa face apel la utilizarea tehnicilor de sinterizare in camp electric pentru structuri formate din micro-obiecte cu rol de centrii de sinterizare pentru diferite materiale si aliaje cu rol functional. Realizarea unor astfel de compozite printr-o metoda rapida si scalabila la nivel industrial poate conduce la dezvoltarea unor aplicatii cu impact puternic in energie, medicina sau conservarea mediului.

O alta clasa de materiale nanocompozite ce va fi abordata in cadrul proiectului are in centrul atentiei proprietatile catalitice si fotocatalitice pentru aplicatii in domeniul descompunerii fotoelectrochimice a apei si stocarii de hidrogen in stare solida. Descompunerea apei pe cale fotoelectrochimica ofera perspective promitatoare atat pentru generarea durabila de energie cat si pentru stocarea energiei sub forma de hidrogen, cu influente benefice asupra mediului si economiei. Hematita (α -Fe₂O₃) este unul din cele mai promitatoare materiale pentru descompunerea apei. Acest material este un semiconductor de tip n cu un band gap de 2.1 - 2.2 eV, stabil, abundent si neagresiv in mediul inconjurator, band gap-ul sau permite absorbtia unei bune parti din spectrul solar ($\lambda < 620$ nm) si o aliniere a marginii benzii de valenta potrivita pentru oxidarea apei. Pe de alta parte, bioxidul de titan, un semiconductor de banda larga (3.2 eV) cu o conductivitate electrica naturala de tip n a fost primul material folosit la descompunerea fotoelectrochimica a apei. Problema majora in folosirea TiO₂ in celulele PEC este banda lui interzisa mare. Pe de alta parte, amestecurile de hidruri, borohidruri sau amiduri catalizate cu nanoparticule oxidice sau metalice dispersate pe suporturi sunt materiale care prezinta absorbtie/desorbtie eficienta a hidrogenului, cu real potential aplicativ privind stocarea de hidrogen in stare solida.

Dintre materialele nanocompozite cu proprietati electrice si fotoelectrice de interes vor fi investigate doua tipuri de sisteme. Nanostructurile pe baza de SiGeSn prezinta un interes deosebit pentru a fi folosite in microelectronica, optoelectronica si fotonica. Folosirea de nanostructuri pe baza de SiGeSn beneficiaza de mai multe avantaje: acestea sunt aliaje ale elementelor din grupa a IV-a compatibile cu tehnologia Si; prin nanocristalizare se obtin proprietati diferite fata de materialele de volum si aici amintim efectele confinarii cuantice de largire a benzii interzise si varierea acesteia in functie de dimensiunea nanocristalelor (NC); in comparatie cu NC de Si, alierea cu Ge prezinta avantajele unei mai bune confinari a purtatorilor, un control mai bun al efectelor date de interfata dintre NC si matrice [N14], largirea domeniului spectral catre infrarosu apropiat precum si o temperatura de cristalizare mai mica; prin introducerea de Sn in aliajul SiGe se obtine o extindere si mai mare a domeniului spectral in infrarosu si se da posibilitatea obtinerii de materiale pe baza de elemente din grupa Si cu banda interzisa directa; sistemele cu NC atat din aliaje binare cat si ternare din sistemul SiGeSn prezinta avantajul de a avea absorbtie optica crescuta intr-o gama larga de lungimi de unda pentru aplicatii fotoelectrice. Astfel, fabricarea dispozitivelor pe baza de materiale nanostructurate SiGeSn prezinta un interes aplicativ deosebit datorita posibilitatii obtinerii unor proprietati de material tintite prin varierea compozitiei, densitatii, dimensiunii si formei NC. Intre proprietatile electrice, fotoelectrice si optice, pe de o parte, si cele de morfologie pe de alta parte, exista o corelatie puternica, proprietatile nanostructurilor putand fi controlate morfologic. Astfel, din acelasi material se pot obtine parametri de dispozitiv cu o dispersie larga. Interactia luminii cu sistemul de NC este influentata puternic de fenomenul de confinare, perechile electron-gol fotogenerate avand o interactie puternica. S-au raportat fotodetectori de mare performanta cu NC de Ge [N15] si de Si [N16]. Materialele cu NC inglobate in oxid au avantajul unui curent de intuneric mic, ceea ce conduce la sensibilitati mari. In ceea ce priveste proprietatile electrice ale acestor sisteme, o problema deschisa este cea a mecanismelor de transport electric corelate cu morfologia si structura, incluzand si problema mecanismelor de stocare de sarcina in dispozitive de memorie, corelate cu mecanisme de tunelare a purtatorilor. In cadrul grupului care propune aceste teme s-a demonstrat controlul mecanismelor de transport (hopping si tunelare la vecinii cei mai apropiati) in structuri cu nanoparticule/NC de Ge in SiO₂ in functie de conditiile de preparare si concentratia de Ge [N17]. Privind aliajele binare de GeSn, o lucrare recenta [N18] raporteaza cresterea eficientei de fotoemisie in nanostructuri cu GeSn/SiGeSn. Alte rezultate privind proprietatile electrice ale nanostructurilor din sistemul SiGeSn au fost raportate si de grupul nostru pentru straturi continand NC de GeSi [N19].

Cristalele lichide ionice si compozite cristale ionice-nonoparticule sunt studiate in mod extensiv in momentul de fata din cauza recentelor aplicatii gasite: celule solare, membrane, materiale pentru baterii, senzori electrochimic, comutatori electroluminiscenti. Doparea cu nanoparticule a materialelor ce prezinta auto-organizare, asa cum sunt cristalele lichide, poate fi interesanta din cauza modificarii semnificative a proprietatilor lor fundamentale electrice termice, optice. Pentru caracterizarea acestor materiale din punct de vedere structural, termodinamic si electric se vor efectua masuratori de Difractie

de raze X, Calorimetrie diferentia, Termogravimetrie si Spectroscopie dielectrica. O descriere detaliata a comportamentului electric al cristalelor lichide ionice si al compozitelor dopate cu nanoparticule sunt destul de putine. In acest scop vom folosi spectroscopia dielectrica pentru a studia spectrele impedantei celulelor-proba sub influenta mai multor factori: frecventa, temperatura, camp electric de polarizare. Prin fitarea datelor cu functiile model de tip Havriliak-Negami vom putea separa procesele de relaxare si vom obtine, printe altele, energiile de activare si temperatura tranzitiilor de faza. Cristalele lichide (CL) ionice reprezinta o clasa speciala de materiale datorita caracteristicilor lor unice ce rezulta din combinatia proprietatilor dintre cristale lichide si lichide ionice [N20, N21]. In prezent aceste tipuri de materiale sunt studiate in mod extensiv in momentul de fata, iar domeniul de utilizare se maresc continuu din cauza recentelor aplicatii: celule solare, membrane, materiale pentru baterii, senzori electrochimici, comutatori electroluminiscenti.

Pe de alta parte doparea cu nanoparticule a materialelor ce prezinta auto-organizare, asa cum sunt cristalele lichide, poate fi interesanta din cauza modificarii semnificative a proprietatilor lor fundamentale [N22]. Datorita interactiei cu matricea gazda, nanoparticulele alungite si nanotuburile pot fi aliniate sau reorientate de cristalul lichid, producand modificari notabile in proprietatile optice sau electrice [N23], dar si schimbari termodinamice in ceea ce priveste tranzitiile de faza [N24]. Cu toate acestea o descriere detaliata a comportamentului electric al cristalelor lichide ionice si al compozite dopate cu nanoparticule in diferite conditii sunt destul de putine. Modul obisnuit de a studia aceste sisteme compuse este acela de a le modela cu un circuit electric echivalent. Odata ce comportamentul probei+celula a fost tradus in elementele electrice elementare se poate stabili contributia fiecarei componente (CL, nano-prticule, circuite externe) la parametrii electrici [N25]. Aceasta abordare globala prezinta dezavantajul ca nu permite indentificarea mecanismelor ce au loc la scara microscopica. Este cunoscut faptul ca procese de relaxare dielectrica diferite se prezinta in mod asemantor in spectrele permitivitatii sau conductivitatii electrice. Este necesar un model mai profund pentru a descrie sau pentru a separa aceste mecanisme.

De interes aplicativ sunt de asemenea structurile spongioase polimerice dopate cu nanostructuri oxidice (de exemplu, PDMS decorat cu TiO_2 pentru indepartarea poluantilor din apa), care vor fi suspuse investigatiilor curente, impreuna cu analiza sistemelor oxidice defecte din asa numita clasa a oxizilor diluati magnetic. Efectul vacanțelor de oxigen asupra proprietatilor magnetice si feroelectrice in materiale cu structura de dublu-perovskit se va inscrie in cadrul acelorasi studii vizand controlul proprietatilor fizico-chimice in sisteme nanocompozite, prin intermediul ingineriei la nivel microscopice.

Din categoria materialele magnetice vor fi abordate doua sisteme. Magnetii durificati prin cuplaj de schimb sunt o clasa importanta de materiale artificiale de interes ridicat pentru aplicatii de magneti permanenti [N26], iar sistemele formate din hexaferite (faza magnetica dura) [N27] si ferite spinelice (faza magnetica moale) [N28, N29] prezinta un produs energetic maxim, $(BH)_{\text{max}}$, superior hexaferitelor. Scopul acestui studiu reprezinta optimizarea prepararii si procesarii, precum si evidentierea legaturii dintre structura locala si proprietatile magnetice, in vederea cresterii valorilor $(BH)_{\text{max}}$.

Fara indoiala, obtinerea de magneti permanenti (faza dura), fara utilizarea de pamanturi rare (sau cu reducerea drastica a acestora) in compozitie, ramane in continuare o directie actuala de cercetare, care va fi abordata, atat prin dezvoltarea de metodologii privind obtinerea fazelor tetragonale de tip L10, cat mai ales de gasire a materialelor intermetalice nanostructurate, care sa conduca la proprietati magnetice similare celor implicate de fazele tatragonale L10.

Aliajele feromagnetice cu memoria de tip Heusler formeaza o clasa de materiale inteligente cu proprietati atractive pentru aplicatii ca actuatori, senzori, in refrigerare magnetica si spinotronica. Inducerea magnetica a transformarii martensitice (TM), din faza feromagnetica de temperatura inalta (austenita) in faza paramagnetica de temperatura joasa (martensita), spre temperaturi mai scazute, odata cu cresterea valorilor campului magnetic a fost descoperita in aliajele metamagnetice Ni-Mn-X ($X=\text{In, Sb, Sn}$) de tip Heusler [N30]. Transformarea martensitica intre faza paramagnetica de temperatura inalta (austenita) cu structura L_{21} si faza feromagnetica de temperatura joasa (martensita) cu structura L10, din aliajele Heusler pe baza de Fe-Mn-Ga conduce la efectul invers, de crestere al acestor temperaturi cu campul magnetic, observandu-se o variatie de 20 K la un camp magnetic de 7T [N31]. Datorita distorsiunii rețelei in TM se pot obtine deformari reversibile de 3.6% chiar si in probele policristaline. Mai mult decat atat se asteapta existenta unor deformari induse magnetic datorita reorientarii variantilor ca si in Ni-Mn-Ga, deformari de 0.6% fiind confirmate in monocristalul $\text{Fe}_{43}\text{Mn}_{28}\text{Ga}_{29}$ [N31]. Prin modificarea compozitiei aliajului pot fi generate diferente mari de magnetizate

care pot genera MT indusa magnetic. In aliajele stoichiometrice policristaline masive Fe_2MnGa coexista in structura cristalina fazele f.c.c si b.c.c., in timp ce benzile obtinute prin racire ultrarapida reusesc sa pastreze structura cristalina ordonata f.c.c. (L_{21}) [N32, 33]. Variatii mici ale parametrilor tehnicii „melt-spinning” si tratamentele termice pot induce in aliaje structuri cristaline diferite fata de aliajul masiv [N32]. Se propune obtinerea de benzi pe baza de Fe-Mn-Ga prin variatii compositionale, a parametrilor caracteristici metodei de preparare „melt-spinning” si a tratamentelor termice. Se studiaza efectul acestora asupra proprietatilor structurale, magnetice, magneto-elastice si de transport, urmarindu-se stabilirea parametrilor caracteristici si a compozitiilor optime pentru obtinerea unor materiale cu potential in aplicatii.

O clasa interesanta de materiale sunt aliajele meta-magnetice cu TM intre austenita feromagnetica si martensita paramagnetica sau antiferomagnetica [N34-36] si care prezinta efect magnetorezistiv gigant (-60% a fost evidentiata in $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{35}\text{In}_{15}$ de Dubenko si colaboratorii [N37]) un EMC considerabil (pana la 6.5 K pentru variatia adiabatica a temperaturii). Imbunătățirea proprietăților conexe acestor efecte cu potential aplicativ urias se realizeaza prin substitutii cu diverse elemente pentru ajustarea concentrației electronilor de valenta din aliaj [N38, 39], a parametrilor de retea și a structurilor magnetice de spin. De aceea propunem ajustarea stoichiometriei aliajelor care fac parte din clasa meta-materialelor feromagnetice multifunctionale cu transformare meta-magnetica si martensitica de tip Heusler Ni_2MnX ($X=\text{Al}, \text{Sn}$) prin substitutii de Co si Gd, pentru realizarea cuplajului magneto-structural si obtinerea unui efect magnetorezistiv [N40-42] si magnetocaloric [N43, 44] in camp magnetic moderat promitatoare. Totodata, urmarim stabilizarea austenitei ordonate magnetic [N45], cresterea mobilitatii twin-urilor martensitei și adaptarea intervalului de temperatură de lucru la cele mai potrivite aplicații prin asocierea dintre compoziții și tratamente termice diferite.

Tema 3

Cuprinde in general cercetari asupra materialelor cu potential de aplicatii in domenii de bio-senzori, biomedical, sanatate. Mai jos sunt detaliate cercetarile ce vor fi efectuate in viitorul Program Nucleu.

-Studiile coloidale ale hidroxiapatitei dopate cu argint si studii de citotoxicitate pe celule procariote se bazeaza pe o abordare multidisciplinara integrata care implica fizica, chimia si microbiologie. Elementul de noutate al acestui proiect este reprezentat de obtinerea si utilizarea ca si agent antimicrobian a hidroxiapatitei dopate cu argint, in solutie. In acest scop, caracteristicile coloidale ale solutiilor apoase de AgHAp vor fi analizate prin difuzia dinamica a luminii (DLS) si potential zeta, in timp ce investigatiile morfologice vor fi efectuate prin microscopie electronica de baleiaj (SEM). Pentru o evaluare complexa a solutiilor de AgHAp vor fi realizate si masuratori de ultrasunete pentru caracterizarea dispersiilor de particule. Utilizarea masuratori de ultrasunete pentru caracterizarea dispersiilor de particule este de foarte mare actualitate la nivel mondial intrucat poate aduce informatii suplimentare privind gradul de dispersie si vascozitatea solutiilor. Mai mult, studii de citotoxicitate vor fi efectuate pe celule procariote cum ar fi *Staphylococcus aureus* si *Escherichia coli*. In urma acestui studiu se va evidentia influenta concentratiei de argint atat asupra proprietatilor coloidale ale acestor solutii cat si asupra citotoxicitatii. In sprijinul realizarii obiectivului general, obiectele specifice ale proiectului sunt urmatoarele: a) Obtinerea de solutii de AgHAp cu diferite concentratii de ioni de argint; b) Caracterizarea coloidala a solutiilor de AgHAp; c) Caracterizarea dispersiilor de particule prin masuratori de ultrasunete; d) Evaluarea activitatii antimicrobiene *in vitro* a solutiilor de AgHAp cu diferite concentratii de ioni de argint.

-Obtinerea de straturi subtiri de bionanoceramici cu proprietati antimicrobiene si evaluarea morfologica si antifungica a acestora. Straturile subtiri vor fi obtinute prin metoda sol-gel folosind un nanogel de hidroxiapatita dopata cu zinc (ZnHAp) in diferite concentratii. Morfologia straturilor obtinute se va evalua prin microscopie electronica de baleiaj (MEB). Analiza elementala se va realiza prin EDX. Mai mult decat atat, va fi evaluata si activitatea antifungica a filmelor subtiri ZnHAp cu diferite concentratii de zinc folosind culturi de *Candida albicans* (*C. albicans*) in diferite conditii de iluminare cum ar fi lumina zilei si iluminarea UV. Scopul principal al acestui studiu este de a rezolva o problema de mare actualitate cu care se confrunta domeniul sanatatii, si anume aceea a infectiilor pre si/sau post operatorii. Pentru implementarea proiectului se vor utiliza atat rezultate experimentale obtinute in urma cercetarilor fundamentale asupra pulberilor de ZnHAp cat si rezultate experimentale privind straturi subtiri de ZnHAp. Obiectivul principal al acestui studiu conta in obtinerea unor straturi subtiri de bionanoceramici cu proprietati antimicrobiene pentru aplicatii biomedicale. Pentru indeplinirea acestui obiectiv vor fi

indeplinite se va urmări: a) Obținerea de nanogeluri de ZnHAp cu diferite concentrații de ioni de zinc; b) Caracterizarea fizico-chimică a nanogelurilor de ZnHAp; c) Obținerea de straturi subțiri de ZnHAp prin metoda sol-gel; d) Elaborarea unui model experimental privind condițiile optime de obținerea straturilor subțiri; e) Caracterizarea fizico-chimică a straturilor subțiri de ZnHAp; f) Evaluarea activității antimicrobiene *in vitro* a straturilor subțiri de ZnHAp.

-Aliajele feromagnetice cu memoria formei având în compoziție elemente biocompatibile, formează o clasă de materiale inteligente cu aplicații în dispozitive medicale, ca de exemplu actuatori medicali, catetere, stenturi, roboți endoscopici sau sisteme pentru eliberarea medicamentelor [1-3]. În aliajele convenționale cu memoria formei, funcționarea reversibilă a efectului de memorie a formei este aproape imposibilă “in vivo”, datorită temperaturii constante a mediului biologic, situație în care aliajele feromagnetice cu memoria formei constituie o alternativă clară datorită acțiunii reversibile, fără contact cu mediul biomedical prin intermediul unui câmp magnetic extern. Acesta din urmă induce deformări reversibile utilizabile și pentru reajustarea dispozitivelor medicale (stenturi, cleme) în timpul sau după mult timp de la introducerea acestora. Aplicațiile medicale necesită biocompatibilitate crescută, pentru a fi evitate procesele inflamatorii și citotoxicitatea, situație demonstrată cu succes în aliajele $\text{Fe}_{70}\text{Pd}_{30}$ [3]. Transformarea martensitică, responsabilă pentru efectul de memorie a formei se manifestă la temperaturi apropiate de temperatura camerei, existând posibilitatea ajustării acesteia prin tehnica de procesare, tratamente termice sau obținere de aliaje ternare. Pornind de la excelența biocompatibilitate a titanului, la care se adaugă rezistența la coroziune și proprietatea de non-carcinogen a acestuia, se propune realizarea de aliaje ternare Fe-Pd-Ti sub formă de benzi, urmărindu-se efectul metodei de preparare și al nivelului de substituție, asupra transformării martensitice și a deformărilor induse de aplicarea unui câmp magnetic extern. Solidificarea ultrarapidă, permite înghețarea fazei transformabile stabilă la temperaturi înalte și obținerea acestor aliaje direct sub formă de benzi [4], un avantaj în realizarea dispozitivelor cu aplicații medicale. Se vor determina domeniile de concentrație ale elementului de substituție pentru care transformarea martensitică se obține la temperaturi superioare temperaturii camerei. Studiarea proprietăților magneto-structurale ale aliajelor Fe-Pd-Ti, se va face prin măsurători magnetostrictive și expansiune termică liniară.

-Sticlele silicice sunt binecunoscute pentru biocompatibilitatea și bioactivitatea lor [5]. Caracteristica principală a acestui grup de materiale este capacitatea de a interacționa intim cu țesutul osos în mediul fiziologic, de aici și caracterul bioactiv. Mai mult, datorită biocompatibilității, pe suprafața acestui tip de material, celule de diferite fenotipuri (nu doar osteogenic) se pot dezvolta în mod armonios. Acest material conține predominant dioxid de siliciu (formator de rețea) dar și alți oxizi metalici (modificatori de rețea), iar prin modificarea raportului formator/modificatori de rețea, rata de solubilitate în mediul fiziologic poate suferi modificări importante. Astfel, straturile subțiri de sticlă silicică ar putea fi utilizate în micro-electronică, cu aplicații în domeniul sănătății. Acest tip de dispozitive se regăsesc sub titlul generic de bio-electronică. Acesta descrie o ramură complementară a nano-tehnologiei, fiind un sub-domeniu ce își propune dezvoltarea unor dispozitive precum platformele electronice ultra-subțiri pentru intervenții chirurgicale, implanturile inteligente, senzorii de diagnostic sau componentele electronice bio-degradabile pentru monitorizarea parametrilor fiziologici [6]. În acest context, propunem investigarea acestui grup de materiale pentru eventuala lor utilizare, cu rol pasiv ca substrat biocompatibil și biodegradabil pentru micro-dispozitive electronice sau, cu rol activ ca dielectric pentru structuri de tip capacitor sau tranzistori cu efect de câmp.

-Tot din categoria materialelor cu potențiale aplicații în domeniul sănătății sunt și materialele piezoceramice. Titanat zirconat de Pb (PZT) prezintă excelențe proprietăți piezoelectrice și a contribuit la dezvoltarea de noi arhitecturi de transformatoare piezoelectrice. Succesul comercial a venit în anii 2000 prin folosirea acestor transformatoare la generarea de tensiuni înalte pentru iluminarea de fundal pentru lămpile fluorescente cu catod rece utilizate la monitoarele cu cristale lichide. În prezent interesul este focalizat pe realizarea transformatoarelor piezoelectrice de putere cu aplicații energetice, spațiu, apărare și securitate. Generarea de tensiuni mari cu ajutorul materialelor piezoelectrice [7,8] are însă și aplicații în domeniul sănătății la obținerea ozonului necesar pentru ozonoterapie precum și a plasmelor reci care sunt folosite pentru efectul lor oxidativ ce inhibă creșterea microorganismelor. Sunt astfel generate specii pe bază de oxigen și azot încărcate pozitiv sau negativ cu rol important în sterilizare. Aplicațiile întrevăzute sunt în medicina umană și dentară, industria alimentară, modificarea proprietăților biomaterialelor, etc. Cel mai important element pentru realizarea acestor aplicații este materialul folosit la realizarea elementului piezoceramic. Vor fi studiate din punct de vedere morfo-structural, dielectric și

piezoelectric o serie de noi compoziții de material de tip PZT „dur” dopat cu elemente chimice cu caracter acceptor.

În ceea ce privește partea de **biomateriale**, se va urmări dezvoltarea de (i) biomateriale anorganice (ceramice, metalice și compozite) pentru tratament, ranforsare sau protezare în trei patologii (cardio-vasculară, ortopedică și dentară), (ii) obținerea și optimizarea de sisteme nanostructurate terapeutice antitumorale (utilizând atât hipertermia magnetică cât și terapia fotodinamică), (iii) identificarea de soluții antimicrobiene/antiinfecțioase eficiente, (iv) crearea de platforme inovative de evaluare și diagnosticare rapidă, (iv) aplicații și cercetări corelate în domeniul medicinei alternative.

-Sunt prevăzute etape privind modularea caracteristicilor (nano)-mecanice ale acoperirilor subțiri implantologice, precum și realizarea de proteze „scaffold” din materiale bioactive prin printare 3D cu utilizare în ingineria tisulară. În implantologia osoasă, datorită încărcărilor biomecanice extrem de mari sunt preferate materialele metalice pentru fabricarea endoprotezelor și implanturilor. Combinarea proprietăților mecanice foarte bune ale materialelor metalice suport cu capacitatea osteogenică a materialelor ceramice/vitroase de a treia generație (hidroxiapatita dopată, bio-sticlele silicatică și fosfatice) sub formă de strat subțire este considerată în prezent o soluția optimă pentru îmbunătățirea performanțelor dispozitivelor medicale implantabile [9,10]. Principala provocare o reprezintă însă obținerea de filme subțiri cu aderență puternică la interfața strat biofuncțional ceramic/vitros – substrat metalic, modul de elasticitate și duritate compatibilizat cu cel al osului (pentru a minimiza sau chiar elimina fenomenele de stress shielding – una dintre cauzele majore ale resorbției osoase la interfața implant – țesut), și coeficient de uzură reduși. Proprietăți mecanice ale acoperirilor implantologice reprezintă factor critic pentru realizarea unui implant de succes și stabilitatea acestuia in situ pe termen lung. În cadrul fazei se vor realiza dopaje/aditii controlate în structura hidroxiapatitei și bio-sticlelor urmate de tratamente termice pentru modularea satisfăcătoare a proprietăților mecanice în conjuncție cu analize complexe fizico-chimice (EDS, SEM, XRD, FTIR) și testări de nano-indentare, nano-zgâriere, nano-uzură și pull-out. Ingineria tisulară este o nouă direcție medicală care are ca scop principal refacerea țesuturilor afectate. Protezele de tip „scaffold” cu porozitate controlată din materiale bioactive (e.g. fosfați de calciu, bio-sticle) constituie o soluție fezabilă pentru regenerarea țesuturilor conjunctive dure [9]. Acestea reprezintă o alternativă a transplanturilor unde are loc înlocuirea țesuturilor distruse cu altele procurate din diferite surse (de origine biologică). Producerea de proteze „scaffold” poate fi realizată prin mai multe metode, totuși printarea 3D este foarte interesantă datorită controlului mai precis asupra dimensiunii și distribuției porilor din structură, făcând posibilă obținerea facilă a unor forme complicate. Experimente inițiale sunt deja raportate în literatură [10], totuși numeroase provocări nu sunt încă rezolvate. Astfel, pentru printarea 3D sunt necesare cerneluri și/sau paste care să conțină materialele ceramice și/sau vitroase bioactive, fiind necesare experimente în privința determinării aditivilor și dispersanților necesari pentru a obține proprietățile reologice necesare metodei de printare. Stabilirea acestor materii sursă va fi urmată și de realizarea unor structuri tip proteze „scaffold” pilot, aceasta putând constitui o premieră la nivel național. Mai mult, studii în privința tratamentelor termice post-fabricare a corpurilor verzi obținute sunt necesare și vor fi efectuate pentru a determina condițiile ce conduc la rezistență mecanică fără a altera proprietățile biologice.

-Tot în domeniul aplicațiilor medicale se înscriu și nanocompozitele de tip metal-/oxid magnetic-TiO₂ cu potențial aplicativ în terapii antitumorale combinate care combina proprietățile de hipertermie cu cele fotocatalitice. Obținerea materialelor nanocompozite cu proprietăți fizico-chimice și funcționale complexe reprezintă un domeniu de cercetare aflat în plină ascensiune. Caracteristicile speciale ale acestor nanocompozite derivă din proprietăți specifice ale fazelor componente și proprietăți rezultate ca urmare a interacției acestora. Ne propunem să realizăm sisteme nanocompozite de tip metal-/oxid magnetic-TiO₂ cu proprietăți duale, hipertermice și fotocatalitice, cu potențial de utilizare ca agenți activi în terapii antitumorale. Eficiența funcțională duală a nanocompozitelor preconizate depinde de influența reciprocă, volumică și de interfață, a fazelor componente. Expunerea concomitentă a acestora la iradiere UV și câmpuri magnetice variabile generează procese și efecte care fac obiectul de studiu al fazei propuse.

-Din aceeași categorie a materialelor nanostructurate cu potențiale aplicații sunt și nanoparticulele de oxid de fier cu aplicații în tratamentul neoplasmelor. În ultimii ani, nanoparticulele de oxid de fier superparamagnetice au fost utilizate cu succes ca și agenți de contrast pentru imagistica prin rezonanță magnetică *in vivo*. În cadrul acestui studiu se vor realiza particule de oxid de fier la scară nanometrică biocompatibile ce vor putea fi funcționalizate prin atasarea la suprafața a unor agenți (de legatură, de

permeabilizare, de directionare, etc.), care ar putea fi utilizate în tratamentul neoplasmelor. Nanoparticulele de oxid de fier funcționalizate vor fi caracterizate din punct de vedere morfologic și structural prin difracție de raze X (DRX), microscopie electronică de baleiaj (MEB) și spectroscopie în infraroșu cu transformata Fourier (FTIR). Proprietățile biologice ale nanoparticulelor de oxid de fier funcționalizate vor fi, de asemenea, investigate prin studii de citotoxicitate *in vitro* folosind linii celulare cât și prin studii *in vivo* privind eficiența acestora în tratamentul neoplasmelor induse la animale de laborator. Realizarea de nanosisteme bazate pe nanoparticule de oxid de fier cu posibile aplicații în tratamentul neoplasmelor va oferi o alternativă la metodele clasice utilizate în prezent precum chimioterapia clasică, radioterapia sau intervențiile chirurgicale.

-Funcționalizarea nanoparticulelor de germanat de bismut cu albumina serică bovină (BSA) și legarea chimică a unor compusi de tip antibody, permite identificarea celulelor tumorale [11]. Obiectivele propuse sunt legate de obținerea și funcționalizarea nanoparticulelor de germanat de bismut ca biomateriale și determinarea stresului oxidativ a acestor nanoparticule funcționalizate. Principalele ținte propuse sunt legate de obținerea și modelarea nanoparticulelor de germanat de bismut, pornind de la faza amorfă, controlul dimensiunii nanoparticulelor prin tratamente termice, caracterizarea morfologică și structurală a acestor nanoparticule, funcționalizarea nanoparticulelor obținute cu albumina serică bovină (BSA) ca biomateriale sintetice și caracterizarea acestora, utilizarea/dezvoltarea de senzori electrochimici cu molecule ligand cu terminații amino pentru recunoașterea grupărilor carbonil în BSA pentru cuantificarea gradului de oxidare a acestora, precum și determinarea interacțiilor nanoparticulelor funcționalizate cu BSA cu diverse fluide ale corpului uman ca urina și serul sanguin.

-Tot din domeniul implantologiei face parte și evaluarea stabilității mecanice dentare prin analiză acustică. Cercetările vizează constituirea unei metode practice de evaluare ad-hoc a stabilității implantelor dentare. În esență se poate considera implantul ca fiind un sistem acustic cu conexiuni visco-elastice în țesutul osos. În funcție de gradul de ancorare, acest sistem prezintă moduri proprii care pot fi puse în evidență printr-un impact mecanic de mică energie. Prin analiză Fourier a sunetului produs la impact este posibilă evidențierea unor moduri de oscilație care să fie asociate direct cu gradele de libertate aparute prin creșterea mobilității implantului. Făcând analiză comparată între informația furnizată pe cale radiografică și informația acustică este posibil a stabili o corelație acusto-mecanică care să permită aprecierea directă a stabilității implantului doar prin analiză acustică. O dificultate majoră în acest sens este dependentă de sunetul la impact de factori momentani (forma cavității bucale, particularitățile impactului și a obiectului impactant) și factori locali (țesutul moale al cavității bucale, structura osului, etc.). Sperăm că în contextul de variabile personale să găsim un numitor comun propriu tuturor pacienților care să permită o evaluare obiectivă în cazul unor noi pacienți, printr-o extrapolare decentă.

-În ceea ce privește ramura de **bioeconomie** al prezentului proiect, aceasta se axează în principal pe biosenzori și actuatori. Se are în vedere obținerea unor materiale hibride (miez organic-coajă anorganică) prin acoperirea membranelor fibroase proteice (recoltate din coji de ou) cu nanostructuri de ZnO utilizând depunerea auto-catalitică, o metodă de funcționalizare relativ simplă. Pentru realizarea obiectivului propus vor fi efectuate următoarele activități: a) extragerea membranelor fibroase proteice din coji de ou; b) depunerea prin pulverizare în magnetron a unui strat de Au (cu rol de catalizator în depunerea ZnO) pe suprafața membranelor proteice; c) depunerea auto-catalitică a ZnO pe membranele proteice metalizate; d) caracterizarea prin tehnici complementare (microscopie electronică de baleiaj, difracție de raze X, spectroscopie de reflexie și fotoluminescență) a membranelor proteice, înainte și după acoperirea cu nanostructuri de ZnO; d) investigarea proprietăților de udare a materialelor hibride miez-coajă de tip membrană proteică/ZnO.

-Comportamentul celulelor umane în prezența unor materiale nanostructurate reprezintă o direcție în plină ascensiune în domeniul sănătății. Avantajele folosirii de senzori și biosenzori electrochimici pentru diverși analiți de interes biologic sunt reprezentate de specificitatea, simplitatea, rapiditatea măsurărilor și costurile de fabricație reduse, în comparație cu metodele clasice ce presupun tehnici elaborate, timp de analiză îndelungat, costuri ridicate și personal cu înaltă calificare, ceea ce conduce la imposibilitatea folosirii lor în afara laboratoarelor medicale. Mai mult, senzorii pot fi construiți având diferite arhitecturi, cum ar fi senzori flexibili, ce pot fi aplicați pe piele sau senzori implantabili. În acest context, scopul proiectului este de a testa comportamentul diferitelor linii celulare umane în prezența materialelor nanostructurate utilizate pentru fabricarea de senzori și biosenzori electrochimici, ce pot contribui la creșterea calității vieții și prevenirea anumitor anomalii medicale, pentru monitorizarea compușilor de interes biologic. Într-un prim pas se va avea în vedere fabricarea de suprafețe solide și fibre electrospinate

pe bază de metale (e.g. Au, Pt, Pd, etc), oxizi metalici (e.g. ZnO, CuO, TiO₂, Sm₂O₃, etc.) și compuși pe bază de carbon (e.g. nanotuburi, grafenă, etc.), ulterior aceste materiale fiind testate în prezența a diferite linii celulare umane. Această abordare constituie punctul de plecare pentru dezvoltarea de noi senzori și biosenzori, ce vor putea fi integrați în dispozitive biotehnologice necostisitoare, prin combinarea proprietăților materialelor nanostructurate cu tehnicile electrochimice.

- Fabricarea de microactuatori se va realiza prin acoperirea membranelor fibroase proteice (recoltate din coji de ou) cu filme de polipirol utilizand electrodepunerea, o metoda de functionalizare relativ simpla. Pentru realizarea obiectivului propus vor fi efectuate urmatoarele activitati: i) extragerea membranelor fibroase proteice din coji de ou; ii) depunerea prin pulverizare in magnetron a unui strat de Au (cu rol de electrod in electrodepunerea polipirolului) pe suprafata membranelor proteice; iii) depunerea electrochimica a polipirolului pe membranele proteice metalizate; iv) caracterizarea prin tehnici complementare (microscopie electronica de baleiaj, spectroscopie de infrarosu, voltametrie ciclica) a membranelor proteice, inainte si dupa acoperirea cu filmul de polipirol; v) investigarea performantelor microactorului de tip membrana proteica/polipirol in diferite medii.

- Se vor obtine si materiale compozite sub forma de rețele tridimensionale pe baza de nanostructuri de ZnO si CuO prin replicarea membranelor fibroase proteice (recoltate din coji de ou). Pentru realizarea obiectivului propus vor fi efectuate urmatoarele activitati: i) extragerea membranelor fibroase proteice din coji de ou; ii) obtinerea rețelilor tridimensionale pe baza de nanostructuri de ZnO si CuO prin imersarea membranelor proteice in solutii continand sarurile metalice precursore si calcinarea ulterioara a acestora; iii) caracterizarea prin tehnici complementare (microscopie electronica de baleiaj, difracție de raze X, spectroscopie de reflexie si fotoluminescenta) a rețelilor tridimensionale de tip ZnO-CuO obtinute prin replicarea membranelor proteice; iv) investigarea proprietatilor de udare si electrice ale rețelilor tridimensionale compozite de tip ZnO-CuO.

-Materialele compozite pe baza de semiconductori oxidici si nanoparticule metalice cu aplicatii in sanatate obtinute prin metode „verde” de sinteza, sunt putin stidiate in momentul de fata. Particulele de oxid de zinc pot fi produse prin mai multe tehnici cum ar fi precipitarea chimică, sol-gel, descompunerea termică și sinteza hidrotermală. Interesul pentru chimia „verde” a dus la dezvoltarea unei abordări ecologice pentru sinteza structurilor de oxid de zinc si de nanoprticule de Ag, astfel in ultimii ani, o atenție deosebită a fost acordată metodelor acestor metode ecologice pentru sinteza a nanoparticulelor de Ag si de oxid de zinc utilizând extracte de plante care oferă numeroase avantaje: simplitate, rapiditate, compatibilitate pentru aplicațiile biomedicale (deoarece nu folosesc substanțe chimice toxice), eficiența costurilor, fito-compuși (proteine, carbohidrați, flavonoide, fenoli etc.).Pentru caracterizarea complexa a acestor materiale materialelor obtinute se vor efectua masuratori de: spectroscopie cu fotoemisie de raze X (XPS), microscopie electronica de transmisie (TEM) difracție de raze X (XRD), spectroscopie cu transformata Fourier (FTIR), spectroscopie in domeniul spectral UV-vizibil, microscopie electronica de baleiaj (SEM), analiza termică, imagistica FTIR, rezonanța electronică paramagnetică (REP); evaluarea bio-performantelor (capacitatea antioxidanta/activitatea antimicrobiana/estimarea proprietatilor anti-cancer).

- Proiectul vizeaza si studiul activitatii fotocatalitice a nanoparticulelor de TiO₂ acoperite cu polietilen glicol. Polietilen glicol (PEG) este un tip de polimer considerat biocompatibil, folosit frecvent in teste bio-functionale ale nanostructurilor cu scopul stabilizarii coloidale, biocompatibilizarii si/sau functionalizarii acestora. Efectul fotodinamic al nanoparticulelor de TiO₂ rezulta ca urmare a actiunii in mediul biologic a speciilor reactive de oxigen (SRO) fotogenerate pe suprafata acestora. Ca urmare a reactivitatii lor crescute, SRO sunt implicate rapid in reactii de oxidare si nu difuzeaza liber pe distante semnificative in mediul din jurul nanoparticulelor. Ne propunem sa analizam modul in care activitatea fotocatalitica/fotodinamica a sistemelor nanostructurate de tip TiO₂ - PEG este influentata ca urmare a prezentei polimerului pe suprafata nanoparticulelor de TiO₂.

- Tehnologia de electrofilare permite obținerea de fibre (bio)polimerice conductoare de diametre sub-micrometrice. Acestea vor constitui matricele 3D pentru obținerea de platforme senzoriale flexibile cu aplicabilitate în domeniul (bio)senzorilor. Proprietățile materialelor compozite fabricate din i) lianți biopolimerici pe bază de derivați de celuloza și ii) elemente de matrice micro/nanostructurate pe bază de carbon, vor fi adaptate prin controlul parametrilor procedurii de fabricație, dar și prin selecția atentă atât a lianților polimerici cât și a particulelor de carbon, cum ar fi grafit, negru de fum, grafena etc. Obiectivul nostru în acest proiect este axat pe dezvoltarea unor matrice 3D de materiale compozite nanostructurate

pentru obținerea de platforme senzoriale flexibile cu aplicabilitate în domeniul (bio)senzorilor purtabili în vederea monitorizării unor parametri fiziologici.

- Investigații privind efectul alotropilor carbonului asupra agregării proteinelor implicate în declanșarea bolii Alzheimer urmaresc depunerea din solutie folosind metoda Langmuir-Blodgett a straturilor subtiri din amiloid beta, A β (1-42) pentru a investiga formarea structurilor secundare si a formatiunilor tip fibrila in procesul de agregare a amiloidului in functie de prezenta colesterolului si a unui nanomaterial (fulerena). Aceasta metoda este adecvata deoarece asigura obtinerea unor straturi bine definite, de concentratie dorita, iar transferul fiecarui strat se poate realiza la o presiune de suprafata echivalenta cu aceea a membranei biologice. Monostraturi din A β (1-42) si din A β (1-42) continand lipide (colesterol) se vor obtine la interfata aer-apa fiind apoi transferate pe suport solid din Si si Si acoperit cu fullerena (C60) cu scopul de a analiza procesul de agregare a peptidelor. Se evidentiaza astfel efectul colesterolului si al fullerenei asupra mecanismului de agregare a proteinei implicat in procesul distructiv al acesteia asupra membranei celulare. Metodele SEM, AFM si spectroscopia FTIR vor fi utilizate pentru caracterizarea morfologica si spectrala a straturilor obtinute. Proprietatile acestor straturi vor fi comparate cu cele ale straturilor obtinute din aceleasi solutii pe aceleasi substraturi prin evaporarea solventului la temperatura camerei (drop cast). De asemenea va fi investigat si efectul conditiilor de depunere asociate cu metoda de depunere asupra procesului de agregare. Obiectivul fazei este de a studia procesul de aglomerare (agregare) a proteinei amiloid A β (1-42), pe suprafata Si si a Si acoperit cu un strat de fullerena si formarea structurilor secundare/fibrilare in functie de prezenta nanomaterialului si/sau a unui compus lipidic (colesterol).

La nivel de institut, se are în vedere dezvoltarea de noi materiale și arhitecturi pentru senzori și biosenzori cu aplicații în domeniul **Sănătății** prin studiul comportamentului celulelor umane în prezenta materialelor nanostructurate utilizate ca suport pentru platforme senzoriale. Avantajele folosirii de senzori si biosenzori electrochimici pentru diverși analiti de interes biologic sunt reprezentate de specificitatea, simplitatea, rapiditatea măsurătorilor și costurile de fabricație reduse, în comparație cu metodele clasice ce presupun tehnici elaborate, timp de analiză îndelungat, costuri ridicate și personal cu înaltă calificare, ceea ce conduce la imposibilitatea folosirii lor în afara laboratoarelor medicale. Mai mult, senzorii pot fi construiți având diferite arhitecturi, cum ar fi senzori flexibili, ce pot fi aplicați pe piele sau senzori implantabili. În acest context, scopul proiectului este de a testa comportamentul diferitelor linii celulare umane în prezenta materialelor nanostructurate utilizate pentru fabricarea de senzorii si biosenzori electrochimici, ce pot contribui la creșterea calității vieții și prevenirea anumitor anomalii medicale, pentru monitorizarea compușilor de interes biologic. Într-un prim pas se va avea în vedere fabricarea de suprafețe solide si fibre electrospinate pe baza de metale (eg. Au, Pt, Pd etc.), oxizi metalici (eg. ZnO, CuO, TiO₂, Sm₂O₃, etc.) si compuși pe baza de carbon (eg. nanotuburi, grafena, etc.), ulterior aceste materiale fiind testate în linii de cultura celulare umane. Această abordare constituie punctul de plecare pentru dezvoltarea de noi senzori si biosenzori, ce vor putea fi integrați în dispozitive biotehnologice necostisitoare, prin combinarea proprietăților materialelor nanostructurate cu tehnicile electrochimice.

Pentru dezvoltarea generațiilor viitoare de dispozitive usoare, flexibile, pliabile si incasabile folosind tehnologii nepoluante si cu consum redus de energie, compusii organici cu molecula mica si polimerii reprezinta o alternativa viabila. Investigarea proprietatilor optice si electrice de transport ale nucleobazelor este de un mare interes datorita proprietatilor semiconductoare ale ADN-ului si ARN-ului relevante pentru aplicatii electronice si optoelectronice, in functie de proprietatile bazelor componente ale secventelor. Cele mai importante avantaje ale acestor compusi, bazele azotate ale acizilor nucleici, sunt legate de posibilitatea de a putea fi purificate usor deoarece nucleobazele sunt compusi organici cu molecula mica si de posibilitatea de a obtine usor straturi subtiri de o grosime controlata pe diferite substraturi prin metoda clasica a depunerii prin evaporare in vid, nucleobazele putand fi evaporate fara descompunere la temperaturi < 200 °C.

Moleculele heterociclice conjugate ale nucleobazelor prezinta in stare solida proprietati speciale asociate cu particularitatile asamblării într-o structura impachetata si prezinta o margine a absorbtiei fundamentale situata in domeniul UV apropiat. Bazele acizilor nucleici care compun ADN-ul si ARN-ul sunt promitatoare ca materiale verzi (biomateriale) pentru aplicatii in domeniul electronicii in realizarea unor dispozitive electronice/optoelectronice.

Obiectivul principal atins in acest proiect este legat de studiul proprietatilor optice, morfologice, structurale si electrice ale unor straturi subtiri din bazele acizilor nucleici (BAN) componente ale structurilor AND si ARN. De asemenea vor fi investigate proprietatile electrice ale heterostructurilor

Si/BAN/S și Si/BAN/Au utilizând ca BAN guanina, citozina și uracilul, subliniind particularitățile injectiei purtătorilor de sarcină la interfața Si/BAN și Au/BAN în corelație cu morfologia și structura filmului din BAN. Va fi analizat de asemenea efectul unui strat tampon de *of bis* (ethileneditio)-tetratiafulvalenă (BEDT-TTF) și efectul iluminării asupra caracteristicilor I-V ale heterostructurilor mai sus menționate.

Tema 4

Proiectul “Tehnologii emergente, materiale și (nano)structuri functionale pentru domeniile TIC, spațiu și Securitate, Energie, mediu și schimbări climatice și Patrimoniu cultural” își propune să valorifice expertiza INCDFM în trei domenii de interes în Strategia Națională de Cercetare, Dezvoltare și Inovare 2014 – 2020. Este vorba despre două domenii de specializare inteligentă: (1) Tehnologia Informațiilor și Comunicațiilor, Spațiu și Securitate și (2) Energie, Mediu și Schimbări Climatice, la care se adaugă domeniul de prioritate publică (3) Patrimoniu și Identitate Culturală. În prezentarea temelor abordate în cadrul acestui Proiect, din considerente de distribuție omogenă a activităților, am preferat să abordăm separat din cadrul domeniului (1): (1a) Tehnologia Informațiilor și Comunicațiilor și (1b) Spațiu și Securitate. În același timp, ar trebui să specificăm încă de la început că încadrarea temelor de cercetare pe domenii nu este absolută: anumite cercetări din domeniul Mediului, de exemplu, în mod clar vor avea aplicații și în domeniul Securității; sau, atunci când se vorbește despre anumite modele noi de celule solare, ele pot avea aplicații atât în producerea domestică a energiei, cât și în domeniul tehnologiilor spațiale.

În domeniul Energie, Mediu și Schimbări Climatice, INCDFM are rezultate recunoscute în ultimii ani în domeniul celulelor solare, mare parte rezultate în urma unui proiect SEE “Perovskites for Photovoltaic Efficient Conversion Technology”, derulat între 2014 – 2017, cu 6 parteneri (3 din România, câte unul din Norvegia, Danemarca și Islanda), în cursul căruia s-au obținut, în mod reproductibil, printre cele mai ridicate randamente de conversie fotovoltaică pentru celulele solare pe bază de perovskit $(\text{CH}_3)(\text{NH}_3)\text{Pb}(\text{I},\text{Cl})_3$ [pint1-pint3]. La aceste rezultate recente se adaugă preocupări recunoscute în ultimii ani în domeniul semiconductor organici, inclusiv aplicațiile acestora în domeniul conversiei energiei. Împreună cu realizările care au deja o istorie în domeniul semiconductorilor elementari (Si, Ge), III-V și II-VI, acestea au dus la un pachet robust de teme de cercetare în domeniul celulelor solare și materialelor pentru aplicații în domeniul conversiei fotovoltaice, care va fi detaliat în continuare.

Dezvoltarea dispozitivelor fotovoltaice pe bază de Si presupune utilizarea cât mai eficientă a spectrului solar. Astfel, se pot utiliza tehnici de conversie a fotonilor incidenti pe baza efectului de conversie inferioară (down-conversion, DC) sau conversie superioară (up-conversion, UC). Acest efect este obținut prin aplicarea unor straturi subțiri cu proprietăți speciale ce conțin dopaje inteligente cu ioni de pământuri rare. Stratul subțire dopat este transparent la radiația pe care o poate utiliza o diodă de Si și trebuie să fie capabil să convertească fotonii generați de soare. Nu toți fotonii pot fi captați de celula solară, așa cum este cazul celor din infraroșu (IR) sau ultraviolet (UV); aceștia vor fi convertiți în fotoni din spectrul vizibil (VIS) cu ajutorul stratului adăugat pe celulă. Se vor realiza straturi subțiri pe bază de pământuri rare (CeO_2 cu adaos de Yb/Er) pe substrat din Si/celula din c-Si. De asemenea, se intenționează obținerea și studiul unor celule solare din generația a treia, în configurație de diodă Schottky, pe bază de straturi de nanocristale de GaAs, CdTe. Se vor prepara straturi de nanocristale de compuși semiconductori prin procese chimice și electrochimice sau prin procese fizice-evaporare termică, MAPLE, urmate de tratamente termice; se va stabili metodologia de obținere de nanocristale de dimensiune și structură dorită în vederea asigurării reproductibilității straturilor. Ulterior, se vor obține structuri de tip ITO/strat NC/metal (ITO = oxid de indiu și staniu, NC = nanocristale) și se vor studia proprietățile electro-optice ale acestora. În multiple etape ale proceselor de sinteză, metode avansate de caracterizare vor fi folosite, cum ar fi măsurători de compoziție a suprafeței (spectroscopie de fotoelectroni XPS, cu rezoluție unghiulară ARXPS), și de morfologie a suprafeței (microscopie de baleiaj cu efect tunel STM, microscopie atomică de forță AFM, microscopie electronică de baleiaj SEM, microscopie electronică de transmisie TEM), măsurători de caracterizare electrică și optică.

Domaniul celulelor solare cu semiconductor organici a cunoscut un avânt fără precedent în ultimii ani, atât pe plan internațional, cât și în INCDFM. Celulele solare cu semiconductor perovskit hibrid de tip $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$, fabricate în laborator în condiții de umiditate controlată, se situează la ora actuală la un nivel de eficiență de conversie de aproape 23% [Leon1] depășind deja celulele solare cu siliciu amorf, cele mai comercializate în prezent. În celulele solare perovskite hibride, mecanismele principale de

degradare sunt cauzate în special de umiditate, radiații UV, apoi de temperatură și oxigen, ducând la degradarea rapidă a stratului fotoactiv ce induce degradarea accelerată a electrodului metalic superior [leon2]. În ciuda progresului lor extraordinar, un număr de probleme trebuie depășite înainte de a se discuta de comercializare, în principal, stabilitatea pe termen lung în prezența umidității și iradierii UV. Aceste probleme vor fi investigate în mod extensiv în următorii ani. În particular, se va urmări creșterea stabilității celulelor prin încapsularea stratului de perovskit de tip MAPI.

În domeniul celulelor solare bazate pe compuși polimerici, se propune studierea unor structuri organice realizate cu strat activ mixt conținând donori polimerici pe bază de poli(arilenvinilenă) sau poli(arilenetilenă) cu grupări carbazol în pozițiile 2,7 și 3,6 drept compuși cu conducție de tip p. Ca acceptor, compus cu conducție de tip n, este propus un derivat al fullerenei, [6,6]-fenil C₆₁ butiric acid butil ester, [C₆₀]PCB-C4. Acest derivat al fullerenei este caracterizat de o solubilitate crescută în comparație cu fullerenul Buckminster, ceea ce duce la îmbunătățirea morfologiei stratului mixt. Structurile organice cu strat activ mixt vor fi realizate utilizând tehnici ieftine de depunere din soluție, cum ar fi spin coating-ul. Compușii polimerici menționați nu sunt disponibili comercial și au fost sintetizați de colaboratorii de la Institutul de Chimie Macromoleculară "Petru Poni" Iași [raso1]. Vor fi analizate comparativ, din punct de vedere al proprietăților optice și electrice, heterostructuri cu strat activ mixt din compușii menționați cu și fără strat tampon de poli(3,4-etilenedioxitiofena):poli(stirensulfonat)/PEDOT-PSS prezentând poziții adecvate ale nivelurilor energetice pentru a favoriza injecția gurilor din electrodul conductor transparent de ITO, intercalat între ITO și stratul activ mixt. Proprietățile compusilor care intră în alcătuirea stratului mixt afectează parametrii electrice ai structurii de celulă solară. Astfel, diferența dintre HOMO (cel mai înalt nivel molecular ocupat) al donorului și LUMO (cel mai coborât nivel molecular liber) al acceptorului determină valoarea tensiunii de circuit deschis V_{OC} , în timp ce absorbția luminii, eficiența în separarea purtătorilor de sarcină și mobilitatea purtătorilor afectează curentul de scurt circuit, I_{SC} [raso2].

De asemenea, în cadrul acestui Proiect se vor realiza heterostructuri organic/anorganic hibride pentru utilizarea lor în conversia energiei solare. Prin metode chimice umede vor fi obținute nanostructuri anorganice (de exemplu ZnO, CdS, TiO₂ etc.) de diferite forme și morfologii. Acestea vor fi caracterizate din punct de vedere morfologic, structural și optic. Se vor realiza straturi mixte (p-n) din materiale organice (cu molecula mica, ex: ZnPc, Alq₃, C₆₀ sau alți derivați ai fullerenei) prin MAPLE care de asemenea se vor investiga morfologic și optic. Se vor depune straturi hibride fie organice de tip p cu anorganic de tip n, fie organice p, organice n și la care se va adăuga un anorganic n. Acestea vor fi evaluate morfologic, structural și optic. Ulterior, se va trece la realizarea pe ITO (anod) de heterostructuri organice și hibride care vor fi de asemenea caracterizate în principal din punct de vedere optic și electric (la întuneric și la iluminare). Structurile vor fi analizate și comparate pentru a putea evalua ce nanostructuri anorganice (anumit tip, morfologie, dimensiune) au dus la obținerea unor valori mai mari în curent de întuneric sau la apariția efectului fotovoltaic la iluminare. Ca obiectiv principal, ne propunem să obținem heterostructuri hibride organic-anorganice prin metoda evaporării laser pulsate asistată matriceal (MAPLE) pentru potențiale aplicații în domeniul celulelor fotovoltaice. Acestea vor fi caracterizate în vederea evaluării influenței nanostructurilor anorganice asupra proprietăților heterostructurilor realizate. Ca obiective secundare, avem în vedere obținerea și caracterizarea de: nanostructuri anorganice, straturi active subțiri organice, straturi active hibride, heterostructuri organice și hibride de celule fotovoltaice. Scopul acestor cercetări va fi obținerea de materiale pentru aplicații fotovoltaice nu neapărat de randament ridicat, însă de prețuri extrem de competitive.

Intenția acestui Proiect este și punerea în evidență a unei noi soluții de îmbunătățire a eficienței celulelor fotovoltaice pe bază de compuși organometalici, prin realizarea legăturii între stratul donor-acceptor care va asigura o mobilitate mai mare a excitonilor. Proiectul se bazează pe utilizarea unui strat activ nou pe bază de compuși organometalici pentru celulele solare în două configurații: heterojuncțiune de volum și joncțiune donor/acceptor între stratul de compus organometalic (donor de electroni) și filmul pe bază de carbon (acceptor de electroni) [ccio1]. Ambele configurații depind de alinierea benzilor care asigură un transport de sarcină optim între electrozi în aceste structuri sandwich. Mai mult, eficiența transportului de sarcină depinde de lungimea de difuzie a excitonilor la interfețe în aceste configurații. Principala problemă care apare este legată de competitivitatea lungimii de difuzie a excitonilor în aceste configurații comparativ cu perovskitii clasici [ccio2]. În cadrul acestui Proiect vor fi sintetizați și modificați chimic mai mulți compuși organometalici prin funcționalizarea cu anumite grupări funcționale astfel încât să se asigure o legătură cu compusul pe bază de carbon [ccio3,ccio4]. Iradierea cu lumina provenită de la o

lampă cu xenon care emulează spectrul solar va permite determinarea fotocurentului dispozitivelor. Pe lângă sinteza compușilor organometalici, o atenție deosebită va fi acordată obținerii compusului pe bază de carbon, precum și controlului grosimii stratului activ pentru asigurarea unui transport de sarcină optim [ccio5]. Parametrii cei mai importanți care definesc eficiența optimă a acestor dispozitive fotovoltaice sunt: fotocurentul și lungimea de difuzie a excitonilor [ccio6]. Principalele obiective ale acestui Proiect se bazează pe comparația dintre tipuri de celule solare obținute în două configurații: prima configurație constă într-o heterostructură de tip compozit în care există o legătură chimică între compusul organometalic și compusul pe bază de carbon, iar cea de-a doua configurație constă în dispunerea celor doi compuși strat peste strat fără a exista o legătură între ei.

Un alt domeniu în care expertiza INCDFM a crescut exponențial în ultimii ani, în special prin angajarea de personal specializat (doi C.S. II și un C.S. I) se referă la scindarea apei (water splitting), pentru producerea fie de hidrogen, fie de hidrocarburi. Acest domeniu este de un interes major, dat fiind provocările energetice contemporane. Proiectul își propune prepararea unor sisteme fotocatalitice tricomponente pe bază de TiO_2 capabile să efectueze descompunerea fotoelectrocatalitică a H_2O cu generare de O_2 și H_2 . Conceptul de împerechere a semiconducătorilor demonstrează faptul că noile sisteme fotocatalitice create cresc considerabil randamentul reacției de descompunere a apei. La ora actuală, majoritatea studiilor implică numai utilizarea unor sisteme bicomponente, iar un număr destul de restrâns au fost coordonate în direcția utilizării unor sisteme multicomponente. Cu toate că eficiența acestor sisteme multicomponente este mult superioară celor formate prin împerecherea a doi semiconducători, natura complexă și costul mult prea ridicat a făcut ca trecerea la prepararea la scară largă a lor să fie nerentabilă din punct de vedere economic.

O problemă actuală se referă la stocarea energiei. Este binecunoscut faptul că, în momentul de față, capacitatea de stocare a bateriilor folosite este departe de a fi satisfăcătoare, iar acest lucru ne afectează viața de zi cu zi, de la autonomia dispozitivelor pe care le folosim în mod curent (smartphone, tablete, calculatoare portabile) până la implementarea pe scară largă a automobilelor cu propulsie electrică, nemaivorbind de aplicațiile posibile în domeniul aerospațial. Investigarea și prepararea electroliților în stare solidă este de mare interes aplicativ pentru producerea bateriilor solide care atît electrozii, cât și electrolitul în stare solidă. Confecționarea acestui tip de baterii s-a realizat de curând în laborator, iar posibilitatea de folosire la scară industrială e de mare interes la nivel mondial. Electroliții solizi sunt cristale ionice și permit transportul ionilor prin defecte în structura lor atomică. Astfel, studiul la scala nanometrică a cristalelor ionice model este necesară atît pentru producerea de noi electroliți solizi, cât și pentru îmbunătățirea funcționalității lor în vederea aplicațiilor tehnologice de stocare energetică.

De asemenea, se vor sintetiza sisteme nanodimensionale catalizate pentru stocarea eficientă a hidrogenului în stare solidă. Aceste aspecte sunt esențiale pentru propunerea de soluții viabile în domeniul extrem de actual al motoarelor cu ardere interne pe baza combustiei hidrogenului.

Un ultim aspect care va fi investigat în acest Proiect legat de aplicațiile în domeniul Energiei și Mediului se referă la tratamentul reziduurilor (mineralizarea poluanților organici) și extragerea metalelor grele. Ne propunem să evaluăm gradul de incorporare a metalelor grele (Ca, Zn, As etc.) prin procesele de biomineralizare naturală sau indusă de către organismele unicelulare prin procese intra și extracelulare. Evaluarea se va realiza în principal cu ajutorul microscopiei electronice prin tehnicile analitice disponibile.

În domeniul Spațiu-Securitate, INCDFM are o îndelungată tradiție în domeniul detectorilor piroelectrici, fotodetectorilor pentru radiații ionizante (X și γ), materialelor pentru emisia și recepția radiației electromagnetice în domeniul microundelor sau senzorilor de gaze. Aplicațiile actuale din acest domeniu nu se mai cer subliniate, este vorba de mare parte din dispozitivele pe care le folosim în mod curent.

În ceea ce privește fotodetectorii, materiale intens utilizate în domeniul de față sunt materialele feroelectrice, unde în vecinătatea temperaturii de tranziție feroelectric $\rightarrow$ paraelectric constanta dielectrică variază extrem de mult cu temperatura. În consecință, aceste materiale sunt utilizate în special în aplicații legate de detecția radiației infraroșii, iar interesul este în creștere datorită avantajelor pe care acestea le oferă: tehnologie simplă de fabricație, costuri scăzute, posibilități de funcționare la temperatura camerei, domeniu spectral larg de utilizare. Proiectul vizează studiul proprietăților piroelectrice în structuri feroelectrice fără plumb, care conțin filme epitaxiale, realizate prin ablație laser pe diferite substraturi, cu scopul utilizării acestora în senzori piroelectrici, în locul celor care contin plumb (zircotitanatul de plumb, PZT). Se va urmări maximizarea răspunsului piroelectric prin realizarea unor filme subțiri de calitate bună (epitaxiale), prin utilizarea unor contacte metalice adecvate, dar și prin

valorificarea anumitor contribuții extrinseci, ca de exemplu a celor piezoelectrice, la valoarea totală a semnalului piroelectric.

O a doua categorie de materiale pentru detectori piroelectrici sunt materialele calcogenitice. Ne propunem să obținem, printr-o nouă tehnologie mai simplă și mai ieftină, sticle calcogenice cu proprietăți termo-mecanice înalte, pe bază de Ge și Se cu diverse adaosuri, ce au rolul de a lărgi fereastra de transparență a sticlelor Ge-Se (materiale multi-bandă): în spectrul vizibil dar și în benzile de transparență atmosferică II (3-5 μm) și III (8-12 μm). Noua tehnologie de obținere a acestor sticle calcogenice masive implică să inducem reacții chimice între substanțele primare componente prin amestecare într-o moară planetară cu bile în atmosferă neoxidantă, iar pulberea necristalină obținută să fie compactată prin sinterizare în plasma de scânteie (Spark Plasma Sintering - SPS) până când grăunții de pulbere fuzionează complet între ei (nu mai există margini ale grăunților, nu mai există atunci nici împrăștiere a luminii pe grăunți), formându-se astfel o pastilă de sticlă. Calitatea pastilei de sticlă va fi stabilită prin măsurări optice (transmisie optică), mecanice (microduritate) și structurale (difracție de radiație X).

A treia categorie de materiale care vor fi investigate sunt materialele termoelectrice pe baza de skutteruditi. Aceste materiale au formula generică LM_4X_{12} , unde L este un pamant rar, M un metal de tranziție, iar X un metaloid, un element din grupa V sau pnictogen, ale cărui proprietăți sunt între cele metalice și nemetalice; de exemplu fosfor, As, Sb. Aceste materiale pot avea aplicații în dispozitive termoelectrice multi-etaj.

Pentru senzori de radiații ionizante, a patra categorie de materiale va fi formată din nanocristale de CdTe, CdZn, CdZnTe și CdMnTe pe substrat de compusi $\text{A}_{\text{II}}\text{B}_{\text{VI}}$.

În domeniul aplicațiilor de microunde, este binecunoscut faptul că telecomunicațiile contemporane fac apel la benzi de frecvență tot mai înaltă cum ar fi benzile de unde milimetrice și de Terahertzi. În cadrul activităților de cercetare propuse, vor fi investigate dispozitive pasive pentru unde milimetrice și THz care să prezinte caracteristici controlabile într-o bandă de frecvență cât mai înaltă. Vor fi investigate cu precădere dispozitivele de tip defazor precum și atenuatoarele. Pentru realizarea acestui deziderat vor fi realizate materiale dielectrice cu proprietăți speciale în domeniul de frecvență solicitat. Prin simulări electromagnetice de tip "full wave" cu pachetele de programe HFSS și CST aflate deja în dotarea institutului, vor fi propuse geometrii noi pentru dispozitivele investigate. Caracterizarea modelelor experimentale se va face folosind analizoarele de microunde vectoriale Agilent dotate cu extensiile de unde milimetrice precum și spectrometrul THz în domeniu temporal. De asemenea, vor fi analizate o categorie nouă de materiale, cele bazate pe niobiu pentru aplicații în domeniul frecvențelor ultraînalte. Aceste materiale au pierderi dielectrice reduse în microunde și sunt foarte indicate pentru aplicații în comunicații fără fir. Prin studiul, proiectarea și optimizarea proprietăților se urmărește obținerea de materiale multifuncționale cu permitivitate electrică ridicată, pierderi reduse și deriva termică a permitivității controlată. Pe baza rezultatelor obținute, se vor avansa propuneri concrete de componente pasive de microunde, la nivel de demonstrator.

Domeniul senzorilor de gaze merită o atenție specială în cadrul acestui Proiect. În primul rând, este necesar un efort teoretic susținut pentru înțelegerea în detaliu a proprietăților gaz-conductive și a corelațiilor dintre conductibilitatea de suprafață și proprietățile de volum (în particular, doparea și mobilitatea purtătorilor de sarcină), precum și modelarea curburilor de bandă care apar spre suprafața materialului, atât în absența, cât și în prezența speciilor gazoase adsorbite. Aceasta modelare se va realiza într-o primă activitate.

În al doilea rând, este cunoscut faptul că performanțele senzorilor de gaze sunt puternic afectate de prezența vaporilor de apă. Se propune, într-o a doua activitate, elaborarea de soluții aplicative pentru îmbunătățirea selectivității senzorilor chemorezistivi prin folosirea unui sistem binar de materiale oxidice semiconductoare, SnO – NiO. Aceasta va permite evaluarea specificității morfologice induse de parametrii de sinteză hidrotermală și validarea în laborator a funcționalității sistemului prin simularea condițiilor atmosferice și a noxelor potențial prezente în teren. De asemenea, se va elabora un material nanocompozit pe bază de calcogeni și porfirine hidrofobe pentru senzori de gaze toxice sau explozive, sub forma de strat subțire, sensibil la gaze specifice și în prezența vaporilor de apă.

Ajungem astfel la o altă temă propusă, aceea de dezvoltare de noi acoperiri termorezistente pentru aplicații aerospațiale. Structuri de acoperiri cu rol de barieră termică (TBC = Thermal Barrier Coatings) au fost dezvoltate pentru a crește temperatura de lucru a componentelor din motoarele cu turbină folosite în aeronautică. Comparativ cu motoarele fără barieră termică, operabile între 500-700 $^{\circ}\text{C}$, în cazul componentelor acoperite cu structuri de barieră termică temperatura de lucru a motoarelor cu turbină a

crescut până la valori între 700-900 °C, iar randamentul motoarelor termice a crescut corespunzător. Începând cu anii '60, dezvoltări succesive ale metodelor de depunere și a materialelor au impus începând cu 1980 utilizarea zirconiei stabilizate cu ytrie (YSZ) ca material de bază a structurilor de bariera termică, material devenit standard în ultimii 30 de ani [merc1]. În același timp, s-au dezvoltat metode de depunere în jet de plasmă precum: APS (Air Plasma Spray), EB-PVD (Electron Beam – Physical Vapour Deposition), HVOF/HVOF (High Velocity Air/Oxy Fuel), SPS (Suspension Plasma Spray). Se propune în cadrul acestui Proiect efectuarea mai multor cicluri de cercetare-dezvoltare care au ca obiect optimizarea structurii și parametrilor de depunere pentru acoperiri TBC, obținuți prin depuneri de pulberi de aliaje metalice și ceramice pe epruvete din aliaj inoxidabil.

În domeniul Tehnologiilor Informațiilor și Comunicării, Proiectul își propune inițierea de studii în special în domeniul a noi materiale pentru memorii nevolatile de înaltă densitate, sistemelor opto-magnetice, emisiei luminoase pe bază de diode și transistori organici. Tot în cadrul acestei tematici generale, noile aplicații care folosesc cristale bidimensionale (2D) vor fi abordate prin prisma propunerii de noi tehnologii de sinteză a acestor materiale, dat fiind că metodele clasice de sinteză și transfer produc o densitate mare de defecte, precum și oxidări necontrolate.

Privind memoriile cu poartă flotantă, în cadrul Proiectului se vor obține structuri cu proprietăți de memorie formate din nanocristale (NC) de Ge sau GeSi înglobate în diferiți dielectrici cum ar fi SiO₂, HfO₂ sau ZrO₂. Se vor urmări proprietățile de stocare de sarcină ale NC în structuri de capacitatori MOS. O altă categorie care va fi investigată este formată de memorii feroelectrice. Prezentul proiect propune realizarea unui studiu din care să rezulte cunoștințe despre modalitatea prin care se poate genera și controla un gradient de tensiune a rețelei, precum și efectele acestuia asupra proprietăților macroscopice. Aceste rezultate sunt necesare în dezvoltarea memoriilor pe bază de structuri feroelectrice epitaxiale multistrat. Studiile se vor concentra pe identificarea mecanismelor de conducție și a modului în care acestea sunt influențate de grosimea stratului, temperatura și de tipurile de metale folosite ca electrozi.

Proiectul își propune să investigheze proprietățile de semiconductor magnetic diluat (Diluted Magnetic Semiconductor, DMS) ale compușilor MnSi obținuți sub formă de straturi subțiri în urma depunerilor controlate prin epitaxie în fascicul molecular (molecular beam epitaxy, MBE) de Mn pe suprafețe Si(001) și respectiv Si(111) atomic curate la diferite temperaturi ale substratului. Investigarea proprietăților DMS se face cu ajutorul mai multor tehnici, unele *in-situ*, precum spectroscopia de fotoelectroni (X-ray photoelectron spectroscopy, XPS) și difracția de electroni lenți (low-energy electron diffraction, LEED) și alte *ex-situ*, precum magnetometriile MOKE (magneto-optic Kerr effect) și SQUID (superconducting quantum interference device), precum și spectroscopia XAFS (X-ray absorption fine structure). Avem în vedere corelarea proprietăților feromagnetice ale compușilor obținuți la diversele temperaturi cu concentrația de element magnetic (Mn) și aceea de purtători prin modele de tipul Zener sau RKKY (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida).

În legătură cu posibilitățile de sinteze *in situ* ale straturilor 2D de grafenă, se va realiza un evaporator cu bombardament electronic care poate atinge temperaturi foarte ridicate (2500 - 3000 °C) pe un vârf din carbon, pentru evaporarea controlată a carbonului în vederea sintezei de straturi grafenice prin „carbon molecular beam epitaxy” (CMBE). Dispozitivul va fi prevăzut cu răcire, cu un „shutter” și cu o electrodă de monitorizare a fluxului ionic emis. Va fi testat și caracterizat, determinându-se viteza de depunere în funcție de parametrii de funcționare (întă tensiune aplicată, curent de emisie). Se vor realiza straturi-model de tip grafenic, care vor fi caracterizate prin spectroscopie de fotoelectroni (XPS, UPS) și prin microscopie cu efect tunel (STM).

Prezentul Proiect propune obținerea de tranzistori ambipolari de tip bottom/top layer având ca scop creșterea eficacității cuantice de electroluminescență a acestor structuri, comparativ cu diodele electroluminescente clasice. În comparație cu dispozitivele de tip OLED (Organic Light Emitting Diodes), în care există joncțiuni verticale, în cazul dispozitivelor de tip OLET (Organic Light Emitting Transistors), mobilitatea electronilor și golurilor poate fi mai mare cu patru ordine de mărime, afectând direct eficacitatea dispozitivului și emisia excitonică [icio1]. În cazul OLED-urilor, purtătorii minoritari parcurg distanțe de câteva zeci de nanometri pentru a se recombina cu purtătorii majoritari, pe când în cazul OLET-urilor există distanțe mult mai lungi (zeci de microni), fapt ce impune optimizarea straturilor de transport de sarcină [icio2, icio3]. Optimizarea impune reducerea drastică a proceselor de dezexcitare neradiativă a stărilor excitonice datorită interacțiunilor cu sarcinile transportate, câmpul electric aplicat și contactele cu metalele. Astfel, avantajele acestor dispozitive de tip OLET pot fi sumarizate astfel: (a) Densitatea de curent în structuri OLET este de 1-10 A/cm² comparativ cu 10⁻³-10⁻² A/cm², astfel că

localizarea spațială poate crește distanța dintre excitonii formați și sarcinile electrice induse în structură, fapt ce reduce interacțiunea între aceștia și stingerea excitonilor. (b) Prezenta celui de al treilea electrod induce un balans al transportului de sarcină, reducând și mai mult dezexcitarea neradiativă a excitonilor. (c) Datorită controlului transportului de sarcină, emisiile de lumina sunt combinate într-o singură structură, fapt ce conduce la un înalt grad de integrare a dispozitivelor. În cadrul acestui Proiect se vor obține și caracteriza straturi organometalice prin metode optice și structurale, apoi se vor realiza tranzitori ambipolari de tip bottom layer și se vor măsura parametrii lor de funcționare, în final se vor realiza tranzitori ambipolari de tip top layer, cărora, de asemenea, li se vor determina parametrii de funcționare. Privind dezvoltarea de contacte pentru micro- și nanoelectronică, se intenționează realizarea de contacte ohmice cu o densitate minimă de defecte de interfață, prin creșterea epitaxială unui metal (Ag) cu lucru de extracție similar cu acela al siliciului (4,6 – 4,7 eV). Experimentele vor fi efectuate în incinta de epitaxie din fascicul molecular, în condiții de vid ultraînalt iar atât substraturile, cât și straturile metalice depuse vor fi atomic curate și bine ordonate cristalin.

În domeniul Patimoniului și Identității Culturale, Proiectul își propune studiul materialelor utilizate în coloristica ceramicii și arhitecturii neolitice din epoca bronzului în România. Aceasta presupune efectuarea de investigații fizico-chimice complexe asupra pigmentilor folosiți la decorarea artefactelor, cu ajutorul unor tehnici specifice fizicii (optice, magnetice structurale, morfologice). Se intenționează stabilirea unui protocol experimental pentru analiza completă și complexă a materialelor utilizate în coloristica ceramicii și arhitecturii neolitice și din epoca bronzului în România și interpretarea lor în context arheologic.

- în țară:

Tema 1

INCDFM are o expertiza solida atât în descrierea fenomenelor de transport în sisteme mezoscopice (efect Hall cuantic, efect de drag coulombian, efect Fano mezoscopic) cât și în studiul proprietăților spectrale ale materialelor 2D (grafena, fosforena, rețele Lieb). În câteva publicații recente ale grupului s-au pus în evidență efecte topologice în rețele bidimensionale. Prin simularea de masuratori de transport cu patru terminale s-a putut discuta efectul Hall cuantic de spin în rețea hexagonală specifică grafenei [1]. S-a demonstrat atât analitic cât și numeric prezenta stărilor de margine specifice în cazul diferitelor rețele bidimensionale studiate până în prezent [2,3]. Menționăm că studiile teoretice asupra fosforenei publicate în 2016 [3] reproduc platourile conductanței Hall observate experimental în același an. Abordările teoretice ale transportului cuantic pe stări de margine a fost extins la un cadru ne-Hermitic în [4]. Grupul are experiența și în studiul stărilor de margine cu proprietăți neconvenționale în rețele bipartite (Lieb) [5] și în calcularea proprietăților de transport pentru doturi cuantice din grafena [6]. Recent au fost obținute rezultate remarcabile cu privire la proprietățile magnetice pentru model Hubbard extins în sisteme și molecule bipartite [7,8].

Din 2012 grupul și-a extins tematica de cercetare și la domeniul opticii cuantice a doturilor cuantice self-assembled și al nanomagnetilor artificiali. Rezultatele obținute până în prezent constau în: i) descrierea dinamicii stărilor excitonice și biexcitonice [9]; ii) evidențierea rolului cuplajului de schimb dintre stările excitonice și spinul unei impurități localizate într-un dot cuantic asupra spectrelor de fotoluminescență [10]; iii) prezicerea efectelor amestecului stărilor de tip gol ușor și gol greu asupra proprietăților optice ale doturilor dopate cu impurități magnetice [11] și iv) descrierea proceselor de transport și a dinamicii spinului molecular în nanomagnetii [12,13].

În ultimii cinci ani în INCDFM s-a cristallizat un grup de modelare de materiale prin metode numerice (Materials by Design) care realizează calcule numerice DFT și modelare teoretică pe o gamă amplă de materiale și dispozitive investigate experimental în institut. Scopul acestui grup este de a susține cu studii teoretice rezultatele experimentale obținute în cadrul laboratorului de heterostructuri complexe și materiale multifuncționale. Un interes deosebit îl prezintă modelarea heterostructurilor complexe bazate pe materiale perovskitice. Recent, grupul experimental a încheiat cu succes proiectul internațional PERPHECT din cadrul Programului SEE ce a urmărit studierea și realizarea de celule solare bazate pe perovskiti halizi [14-16]. Pe această direcție au fost efectuate o serie de studii numerice pentru investigarea interfetei dintre un feroelectric tradițional cum este PbTiO_3 și un perovskit halid de tipul $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$ [17]. Astfel a fost observată influența direcției polarizării feroelectrice asupra barierei de potențial de la interfața dintre cele două materiale indicând un posibil mecanism de drenare a electronilor generați în halid departe de interfața. O altă temă de cercetare abordată a fost studierea heterostructurilor realizate din straturi subțiri de tipul: feroelectric/perovskit izolator/feroelectric.

Rezultatele obtinute experimental sub forma de caracteristici current-tensiune (I-V) si polarizare-tensiune (P-V) indica posibilitatea folosirii acestor structuri in memorii non-volatile cu mai multe starii [18]. Aceste structuri au fost modelate teoretic folosind teoria Landau-Ginzburg-Devonshire pentru a stabili interactia dintre polarizarile celor doua straturi feroelectrice ceea ce duce la aparitia de stari multiple de polarizare [19]. In general activitatea departamentului de calcule numerice si modelare teoretica urmareste studierea si explicarea rezultatelor obtinute in urma masuratorilor experimentale [20-22].

In prezent, in INCDFM o intensa activitate de cercetare la scala nanometrica si a efectelor de suprafata vizeaza realizarea materialele functionale si/sau multifunctionale cu proprietati magnetice [23,24] si electrice bazate pe existenta infrastructurii adecvate. De asemenea exista si posibilitatea continuarii colaborarii internationale in investigarea prin microscopia de efect tunel (STM) a sistemelor moleculare si a interactiilor la interfata metal-organica posibil a fi modificate sub actiunea stimulilor electrici [25-28]. Pe plan national studiul multiferoicilor se focalizeaza asupra oxizilor anorganici, conform rezultatelor publicate in revistele ISI.

In INCDFM s-a reusit recent sintetizarea straturilor feroelectrice subtiri, atomic curate [29]. Modelul care s-a impus in ultimii ani privind felul in care straturile subtiri feroelectrice isi prezerva structura mono-domeniu este legat de acumularea de purtatori liberi in vecinatatea suprafetelor, cu semne opuse sarcinilor legate de la suprafata [30]. In [31] s-a demonstrat ca procesul de ecranare in straturi feroelectrice ultrasubtiri este predominant intrinsec in timp ce in straturi mai groase caracterul devine extrinsec. Prezenta unei concentratii mari de purtatori liberi in straturile de PZT a fost atribuita unui mecanism de auto-dopaj (self-doping) care se activeaza in timpul procesului de crestere. In virtutea rezultatelor din [29,33], se contureaza ideea ca polarizarea orientata spre interior se stabilizeaza in cazul suprafetelor ultracurate. Se remarca faptul ca toate realizările din domeniu pana in prezent au fost realizate de grupuri din tara.

Tematica masei efective in heterostructuri multiferoice a fost initiata in Grupul de Fizica Suprafetelor si Interfetelor pe sisteme constand din heterostructuri bazate pe LSMO si feroelectrici BaTiO₃ crescute pe substrat de titanat de strontiu avand orientarea (001) [34], insa informatiile despre cuplarea ordinii feroelectrice cu cea feromagnetica au fost culese folosind spectroscopia de fotoelectroni excitati cu radiatie X moale, lipsindu-i rezolutia unghiulara, si implicit accesul direct la dispersiile benzilor electronice de la nivelul Fermi. Abordarea propusa aici presupune investigarea directa a starilor din vecinatatea nivelului Fermi, cele implicate in procesele de conductie si tunelare folosind spectroscopia de fotoemisie cu rezolutie unghiulara (ARPES) si energie a fotonilor incidenti la limita de absorbtie a starilor Mn-2p, fapt ce ofera atat selectivitatea chimica in interpretarea rezultatelor, cat si amplificare a semnalului cu doua ordine de marime datorita excitarii rezonante a starilor 2p pe orbitalii 3d din patura de valenta.

Grupul de Procese Optice in Materiale Nanostructurate are o experienta si vizibilitate internationala considerabile in functionalizarea nanotuburilor de carbon si grafenei. Lucrari stiintifice reprezentative pentru tematica prezentului proiect sunt [35-39]. Caracterizarea nanocompozitelor si a materialelor nanostructurate se face prin metode optice (spectroscopie Raman, FTIR). Exista de asemenea expertiza in sinteza electrochimica a polimerilor cu proprietati speciale si in sinteza si caracterizarea sticlelor calcogenice. In ceea ce priveste studiile pe fosforena raportate de autori din Romania, conform bazei de date Web of Science, pana in prezent a fost publicata doar o lucrare teoretica focalizata pe efectul Hall [3] si o lucrare experimentală a grupului de Procese Optice in care s-a studiat imprastierea Raman in lumina polarizata [35]. In ceea ce priveste proprietatile spectroelectrochimice ale nanotuburilor de carbon cu un singur perete inalt separate in tuburi metalice si semiconductoare functionalizate prin electro-oxidarea trifenilaminei mentionam ca pana in prezent au fost publicate 51 de articole in jurnale cotate ISI, din care doar doua articole au fost publicate de autorii din Romania [36,37]. In ciuda acestui fapt, notam ca la nivel national exista lucrari publicate pe compusi macromoleculari cu proprietati similare politrifenilaminei, un exemplu in acest sens fiind polidifenilamina si compozitele sale cu nanotuburi de carbon [38-40].

In institut exista de asemenea o excelenta expertiza in studiul nanofluorurilor dopate cu pamanturi rare cu efect de up conversie. Mecanismul de cristalizare a compusului NaYF₄:(Yb,Er) obtinut prin metoda sol-gel cu proprietati de up-conversie a fost studiat atat prin metode calorimetrice (differential scanning calorimetry) cat si prin abordari "model-free" si "model fitting" [45,46]. Recent a fost prezentat si un studiu comparative al proprietatilor filmelor subtiri Yb₃₊/Er₃₊ dopate cu LiYF₄ obtinute prin tehnici PLD

si MAPLE. Anterior s-au sintetizat si studiat diferite astfel de sisteme, prin diferite metode (PLD, MAPLE, sol-gel): LiYF_4 dopat cu Eu [47], BaFBr:Eu_2 +nanofosfor- SiO_2 in matrice de alumina anodizata [48], si BaFBr-Eu_2 + SiO_2 core-shell [49].

In pofida faptului ca tematica izolatorilor topologici este de mare actualitate, beneficiind de o reprezentare generoasa in literatura de specialitate, pe plan national o astfel de abordare lipseste cu desavarsire. In plus, extinderea conceptului de izolator topologic la sisteme oxizi cu cristalizare in structura perovskit constituie un aspect de noutate absoluta pe plan national.

Unul din motive este acela ca problematica necesita folosirea spectroscopiei de fotoelectroni cu rezolutie unghiulara (ARPES) care este disponibila doar in INCDFM la clusterul de stiinta suprafetelor si la echipamentul de microscopie de fotoemisie (LEEM/PEEM) al Laboratorului de Fizica Starii Condensate la Scala Nanometrica. Caracterul 3D al starilor protejate topologic presupune insa investigarea dispersiilor electronice in toate cele trei directii ale impulsului. Aceasta implica folosirea radiatiei incidente cu energie acordabila, disponibila doar la facilitatile de sincrotron. Masuratorile de spectroscopie de fotoemisie cu rezolutie unghiulara (ARPES) in domeniul 300 eV-1keV vor fi efectuate la linia de fascicul ADRESS de la sincrotronul Swiss Light Source in baza unei intelegeri bilaterale intre INCDFM si SLS.

Tema 2

Proiectarea de materiale cu proprietati bine definite prin intermediul studiului structurii electronice pe baza Teoriei Functionalei de Densitate (in diverse variante) se desfasoara in mai multe institutii de traditie din tara (de exemplu, Universitatea Bucuresti, Universitatea Babes-Bolyai, INCDFM, ICECHIM, etc.), accentul punandu-se insa pe diferentierea sistemelor abordate. Compusi Heusler ternari cu aplicatii in spintronica au fost investigati intensiv atat la UBB-Cluj) cat si in INCDFM-Bucuresti [T1-T3], insa studii asupra compusilor cuaternari privind proprietatile de transport electronic si termic sunt inexistente la nivel national (in plus, la nivel national nu au fost abordate efectele implicate de diversele distorsii ale retelei cristaline asupra structurii electronice, distorsii inevitabile la depunerea filmelor subtiri pe substrat). Similar, investigatiile teoretice asupra semiconductorilor sau oxizilor diluati magnetic (cu mici dopaje de elemente magnetice tranzitional) sau de pamant rar, in raport cu comportamentul magnetic si optic sunt extrem de rare, in contrast cu relativ numeroasele studii experimentale vizand strict aspectele magnetice, efectuate pe astfel de compusi. In privinta compusilor supraconductori non centrosimetrici, cercetatorii din cadrul INCDFM au prioritate absoluta privind sinteza compusilor $\text{Li}_2(\text{Pd/Pt})_3\text{B}$ si determinarea pe cale experimentală a proprietatilor lor, rezultatele fiind publicate in referintele [T4-T6]. In continuarea acestor cercetari, in proiect se propune realizarea unui studiu complex, atat teoretic, prin metode DFT, cat si experimental (de validare a rezultatelor simularilor), pentru a elucida mecanismele la nivel atomic in seria $\text{Li}_2[\text{Pd}(1-x)\text{Pt}_x]_3\text{B}$. Obiectivul principal il constituie descrierea interdependentei intre distorsiunile retelei -efectul de "nesting" al suprafetei Fermi si rolul cuplajului spin-orbita, responsabil pentru proprietatile exotice ale acestor materiale. Utilizarea metodei elementelor finite in modele micromagnetice este relativ restransa la nivel national (INCDFM si Universitatea Bucuresti, IFT si Universitatea Alexandru Ioan Cuza din Iasi, etc.), comparativ cu implementarile ei in diversele module ale pachetului COMSOL. Aplicarea lor in cazul unor sisteme nanostructurate, cu dimensionalitate redusa, specifice posibilitatilor de sinteza si caracterizare unice ale INCDFM la nivel national [T7], confera un grad mare de nouate rezultatelor preconizate a fi obtinute pe aceasta cale in proiectul de fata. De asemenea, metodologiile propuse pentru investigarea corelatiilor dintre proprietatile morfo-structurale si proprietatile magnetice si/sau electronice ale diverselor tipuri de nanostructuri reprezinta elemente de noutate pe plan national. Astfel, tehnica de caracterizare a materialelor nanostructurate prin tomografie cu electroni reprezinta o premiera nationala in domeniul fizicii materialelor si urmareste reducerea decalajului fata de imagistica 3D existenta la nivel international. Proiectul urmareste introducerea in premiera nationala a unei tehnici de cartografiere structurala bazata pe precesia fasciculului de electroni, introdusa recent in Europa. La nivel national investigatii microstructurale bazate pe difractia fasciculului de electroni in conditiile de precesie au fost abordate la Universitatea Ovidius din Constanta, concentrandu-se pe obtinerea si interpretarea difractogramelor de electroni in raport cu intelegerea contributiilor efectelor dinamice, precum si rafinarea acestora printr-un formalism de tip Rietveld aplicat pe sisteme de nanoparticule metalice (Au, Al) [T8]. In cadrul acestui proiect vom avea o abordare mai complexa, in premiera la nivel national, bazata pe combinarea difractiei de electroni cu fascicul in precesie cu modul de observare STEM. Combinarea informatiei din spatiul direct si spatiul

reciproc va permite determinari structurale locale sub forma de cartografie structurala de inalta rezolutie spatiala (pana la scala nanometrica) in sisteme complexe precum ceramici supraconductoare, straturi subtiri policristaline, sisteme de nanoparticule.

Privitor la elucidarea modului de crestere preferentiala a planelor cristaline la interfata filmelor metalice cu suprafetele semiconductoare epitaxiale prin intermediul figurilor de poli obtinute prin difractie de raze X, aceasta reprezinta o prima tentativa la nivel national, cu atat mai mult cu cat, inclusiv din punct de vedere experimental, sistemele pretabile a prezenta acest fenomen au fost preparate si raportate in premiera in cadrul INCDFM [T8, T9]

Sinteza si caracterizarea de noi nanosisteme cu dimensionalitate redusa reprezinta o arie de interes larg raspandita la nivel national, la care INCDFM isi are o contributie substantiala, legata atat de facilitatile experimentale detinute cat si de expertiza si multidisciplinaritatea personalului, dovedite de-a lungul timpului. **In privinta sistemelor 0D**, prepararea si caracterizarea sistemelor de NP (simple sau cu structura core-shell, disperse sau in interactie, etc.) cu proprietati ajustabile reprezinta o indelungata traditie in INCDFM. In productie de serie a ceramicilor magnetice (de exemplu feritele), problema cea mai importanta a fost si este reproductibilitatea proprietatilor. Dificultatile apar datorita faptului ca multe din proprietatile necesare pentru aplicatiile feritelor nu sunt intrinseci (volumetrice), ci extrinseci (dependente de microstructura). Aceasta inseamna ca feritele nu sunt definite complet prin compozitia chimica si prin tipul structurii cristaline, ci trebuie cunoscuti si controlati parametrii sai microstructurali, cum sunt: densitatea, porozitatea si distributia sa intra- sau intergranulara, dimensiunea granulelor, etc, parametrii puternic dependent de metoda de preparare. In cazul de fata se vor folosi diverse metode de procesare a nanoparticulelor feritice. Desi foarte rar utilizata la nivel national, exista la ora actuala cateva cercetari prin care s-au obtinut nanostructuri de ferita de cobalt din extracte de Hibiscus [D1, D2], prin metode de piroliza laser sau prin diverse procesari chimice, prioritatea actuala fiind destinata stabilirii corelatiilor dintre metoda de procesare si proprietatile magnetice asociate.

O alta metoda de sinteza neconventionala care sa conduca la formarea de sisteme 0D cu proprietati remarcabile o constituie depunerea de nanoparticule din metale nobile pe suprafete feroelectrice. Nanoparticulele incarcate cu sarcina (cu grad de incarcare controlabil prin polarizarea feroelectricului) pot capata astfel proprietati catalitice deosebite. Pe plan national aceasta problematica este abordata exclusiv in INCDFM. Astfel, echipa din INCDFM se situeaza in ultimii ani pe un loc remarcabil printre cele cca. 12 echipe existente la nivel international care raporteaza rezultate privind reactivitatea de suprafata a feroelectricilor; in particular, aici se afla prima echipa care a raportat experimente de adsorbtie dissociativa si desorbtie oxidativa a monoxidului de carbon de pe suprafete feroelectrice monocristaline, atomic curate, prin metode ale stiintei suprafetelor [D3].

In INCDFM exista o larga expertiza privind prepararea de nanoparticule cu proprietati magnetice destinate inclusiv aplicatiilor biomedicale (de exemplu hipertermia magnetica sau transportul de molecule medicament) precum si in privinta investigarii lor prin diferite tehnici experimentale (SEM, TEM, spectroscopie Mossbauer, difractie de raze X, proprietati magnetice utilizand VSM si SQUID) [D4]. Tot in cadrul INCDFM s-a realizat investigarea magnetica si Mossbauer a nanofluidelor alcătuite din particule de magnetita cu comportare superparamagnetica la temperatura camerei si s-au elaborat si validat modele teoretice privind estimarea ratei specifice de absorbtie a caldurii (SAR) din curbele de incalzire in camp de radiofrecventa (hipertermie magnetica) [D5, D6] si calcule care descriu interactiile dipolare magnetice dintre nanoparticule [D7]. Preocupari privind producerea si investigarea prin diferite tehnici experimentale a nanofluidelor pe baza de magnetita si ferita de cobalt [D8, D9] si a nanofluidelor din nanoparticule preparate prin macinarea benzilor metalice obtinute prin solidificare ultrarapida exista si in alte institutii si universitati din Romania [D10, D11]. Exista de asemenea o buna expertiza in privinta prepararii si caracterizarii sistemelor 0D cu proprietati catalitice, intre care catalizatorii pe baza de Mn s-au dovedit a fi foarte eficienti pentru reactiile catalitice de oxidare [D12, D13].

Sistemele de tipul oxizilor diluati magnetic (DMO) sunt alte sisteme 0D care prezinta un urias potential aplicativ. Aceste sisteme poseda proprietatea de feromagnetism slab numai in conditiile in care se afla in forma de nanocristale 0D, existenta si interactia momentelor magnetice fiind legata nu neaparat de prezenta dopantilor tip metale de tranzitie cu moment magnetic (oricum intr-o concentratie mult inferioara pragului de percolatie), ci mai ales de inducerea anumitor tipuri de defecte amplificate de prezenta dominanta a pozitiiilor de la suprafata nanoparticulelor. De aceea, astfel de sisteme sunt intens studiate in ultimul timp, inclusiv pe plan national, principalele grupuri din tara fiind localizate in INCDFM si la UBB Cluj. In INCDFM exista o larga experienta in acest sens, sistemele DMO (tip

nanoparticule de ZnO si TiO₂, dar nu numai) fiind investigate atat din punct de vedere teoretic cat si experimental [D14-D16]. Ca o prioritate, aici a fost evidentiata efectul de cuplaj unidirectional indus la interfata sistemelor DMO intrinseci cu nano-oxizii de Fe formati pe suprafata nanoparticulelor de TiO₂ [D17]. Desi la nivel national (INCDFM) s-au desfasurat inclusiv studii asupra proprietatilor fotocatalitice ale TiO₂ [D18-D20], pana in prezent nu exista rezultate asupra efectelor campurilor magnetice asupra proceselor fotocatalitice implicate.

In privinta prepararii si caracterizarii sistemelor 2D, INCDFM dispune atat de o baza materiala deosebita cat si de o calificare corespunzatoare a personalului. La nivel national, pana acum, nu s-au raportat studii care sa investigheze feroelectricitatea in structuri pe baza de oxid de hafniu. Integrarea unor astfel de straturi feroelectrice (ex. Al_xHf_{1-x}O₂, Zr_xHf_{1-x}O₂) in structuri metal-feroelectric-semiconductor sau tranzistori cu efect de camp (FET) poate duce la dezvoltarea dispozitivelor de tip FET feroelectric (FeFET)[D21]. Evident, impactul unor astfel de structuri in viata cotidiana are un mare potential. Studiul acestor materiale va conduce la dezvoltarea de dispozitive ce functioneaza la putere mica, procesul de citire/scriere a informatiei este nedistructiv, iar viteza de scriere/citire este mai mare decat in cazul dispozitivelor conventionale. Acest proiect va permite achitionarea de materiale si consumabile pentru procesarea si investigarea materialelor pe baza de HfO₂ cu potential pentru FeFET-uri.

Problematica electrozilor transparenti de interes pentru unele dispozitive opto(electronice) (de exemplu celule fotovoltaice, diode emitatoare de lumina sau tranzistori transparenti) este abordata la nivel national de un numar restrans de colective, grupul din INCDFM avand un rol bine determinat [D22, D23]. In acest context, in INCDFM (in colaborare cu Facultatea de Fizica, Universitatea Bucuresti) este abordata de mai mult timp problematica celulelor fotovoltaice si in premiera aici sunt supuse atentiei celelele solare din compusi hibridi (filme active din perovskiti hibridi organici-anorganici). De mentionat ca la nivel national in INCDFM a fost obtinut un randament de 15% [D24], record in Romania.

Studiul filmelor subtiri feroelectrice sub forma de straturi simple sau integrate in multistraturi complexe (in care fenomenele de interfata joaca un rol esential) constituie un alt domeniu in care INCDFM detine o pozitie privilegiata la nivel national. In INCDFM exista preocupari inclusiv pentru dezvoltarea de materiale feroelectrice fara plumb atat prin metode fizice cat si prin metode chimice. O atentie deosebita a fost acordata obtinerii de tinte solide fara faze secundare care sa poata fi folosite mai departe la realizarea filmelor subtiri de calitate inalta prin metode fizice (depunere in fascicol laser pulsant (PLD), magnetron sputtering, etc.) [D25-D27]. In ultimii ani au fost intreprinse eforturi pentru a realiza si caracteriza straturile subtiri obtinute prin sol-gel sau PLD. De mentionat ca exista si alte grupuri din tara care investigheaza materialele feroelectrice fara plumb (la INFLPR, Universitatea Politehnica din Bucuresti, etc.), interesul acestora fiind focalizat insa mai mult pe partea de obtinere a materialului/structurii si mai putin pe analiza complexa intre structura si proprietati care sa duca la optimizarea caracteristicilor de dispozitiv sau la dezvoltarea de noi aplicatii.

Prioritatile din INCDFM in privinta filmelor subtiri si multistraturilor incluzand sisteme feroelectrice (cu functionalitatile si multifunctionalitatile corespunzatoare) sunt insa legate de dezvoltarea de tehnologii care sa permita cresterea texturata sau hetero-epitaxiala a straturilor feroelectrice pe diferite substraturi mono cristaline de MgO, SrTiO₃, Al₂O₃, sau pe plachete de siliciu cu strat tampon de SrTiO₃ [D28,D29]. Spre exemplu, a fost raportat un raspuns piroelectric cu doua ordine de marime mai mare atunci cand stratul feroelectric de PZT a fost crescut pe substrat de SrTiO₃ cu electrod de SrRuO₃ in comparatie cu cel crescut pe SrTiO₃ dopat cu niobiu. Mai putin studiate au fost proprietatilor feroelectrice la scara nano metrica si investigarea relatiei microstructura-proprietati in aceste materiale iar propunerile din proiect sunt in aceasta directie.

In sfarsit, studiul filmelor subtiri magnetice si supraconductoare are o indelungata traditie in INCDFM [D30-D36]. Desi sunt si alte institutii la nivel national implicate in astfel de studii (in special in cazul filmelor subtiri si multistraturilor magnetice) precum IFT Iasi si UBB Cluj-Napoca, sistemele propuse spre investigare in acest proiect (filme subtiri oxidice cu vacante ajustabile pentru controlul magnetismului si activitatii fotocatalitice, filme supraconductoare decorate si in arhitectura de multistrat si interfete feromagnet/supraconductor) reprezinta prioritati atat la nivel national cat si international. In cazul straturilor subtiri nanostructurate de materiale supraconductoare de temperatura inalta, prima metoda eficienta de fixare a vortexurilor care nu implica costuri mari (ca in cazul iradierii cu ioni grei sau cu neutroni), dezvoltata de un cercetator din INCDFM in colaborare cu un grup japonez, a constatat in depunerea de nano-particule (nano-insule) pe substrat inainte de cresterea stratului subtire, urmata de introducerea de nano-particule si/sau nano-roduri prin depuneri succesive din mai multe tinte si/sau prin

folosirea de tinte cu nano-incluziuni de faze secundare. Ulterior, introducerea de straturi cu grosimi nanometrice in stratul matrice supraconductor (nanostructuri tip multistrat) s-a dovedit utila atat pentru pastrarea unor valori ridicate a densitatii critice de curent in multistraturi de grosimi mai mari (deci curent critic total mult mai mare), cat si pentru crearea de centri pinning aditionali.

Sinteza si caracterizarea de materiale nanocompozite diverse pentru aplicatii high-tech cuprinde clase de materiale nanocompozite putin sau chiar deloc abordate la nivel national, desi prezinta un potential aplicativ ridicat care ar permite introducerea in circuitul socio-economic de noi materiale si dispozitive cu valoare adaugata ridicata. Prin urmare, proiectul isi asigura o nota de *originalitate la nivel national*, dar, in acelasi timp, are un *potential ridicat de valorificare si implementare la nivel national*.

In domeniul materialelor autoreparabile, conform bazei de date Web of Science, folosind cuvintele cheie “Diels Alder Reactions” si “carbon nanotubes”, pana in prezent sunt publicate 195 de articole, niciuna nefiind realizata in Romania, in ciuda faptului ca exista o bogata experienta in domeniul materialelor compozite pe baza de nanotuburi de carbon [N46]. In privinta materialelor termoelectrice pe baza de skutterudit, in prezent, la noi in tara nu exista alte grupuri de cercetare care sa fi investigat acest tip de materiale, cu atat mai putin aceasta strategie de imbunatatire a proprietatilor lor termoelectrice. In INCDFM, insa, exista o buna expertiza in acest domeniu dobandita in institutii cu renume din Europa [N47, N48]. In Romania exista preocupari privind materialele stocatoare de hidrogen sub forma de hidruri metalice de tip FeTi [N49] sau compusi intermetalici pe baza de Mg [N50] dar si stocarea hidrogenului la temperatura azotului lichid in compusi organometalici MOF tip MIL-101 [N51] si stocarea lui in caverne subterane sapate in mine de sare [N52]. In cadrul INCDFM exista o experienta importanta atat in domeniul hidrurilor complexe [N53] cat si privind producerea de materiale nanoporoase de tip siloxanic sau carbonic si realizarea de materiale stocatoare de hidrogen prin impregnarea de hidruri complexe in porii acestora [N54, N55] in vederea imbunatatirii cineticii absorbtiei si desorbtiei de hidrogen. Pe langa producerea de materiale stocatoare de hidrogen si existenta unei infrastructuri complexe pentru investigari structurale, INCDFM dispune de facilitati si are expertiza privind investigarea cineticii si termodinamicii absorbtiei de hidrogen prin metoda volumetrica. In privinta materialelor pentru descompunerea apei, studiile anterioare desfasurate la INCDFM au permis obtinerea electrochimica si chimica de filme simple si nanostructurate de hematita si caracterizarea lor fotoelectrochimica. Dupa cunostinta noastra, in tara exista un singur grup, la INCDFM, cu preocupari legate de prepararea si proprietatile nanostructurilor pe baza de SiGeSn pentru aplicatii in electronica si optoelectronica. Grupul are o experienta vasta in prepararea structurilor cu NC de Ge inglobate in oxizi (SiO_2 , TiO_2 , HfO_2) prin pulverizare cu magnetron si tratament termic rapid (RTA), cu aplicatii in electronica (memorii nevolatile) si optoelectronica (structuri fotosensibile pentru senzori optici, fotodetectori) [56-60]. De asemenea, in INCDFM exista preocupari, de lunga durata, pentru studierea proprietatilor electrice si termodinamice ale unor cristale lichide si a unor compozite cu acestea: cristale lichide – aerosil, compozite cu structuri metalo-organice [N24]. In cazul materialelor nanostructurate cu proprietati magnetice dure, exista in tara o activitate de cercetare relativ sustinuta, bazata pe experienta foarte buna in domeniu a mai multor grupuri de cercetare. In afara INCDFM, care are o experienta de peste 25 de ani in domeniul materialelor magnetice, exista grupuri de cercetare cu activitate sustinuta in acest domeniu la UBB si INCDTIM Cluj, IFT Iasi, Universitatea de Vest Timisoara, UPB Bucuresti, iar mai recent s-au alaturat demersurilor de cercetare in domeniu, Universitatea Transilvania Brasov, Universitatea din Suceava si Universitatea Ovidius din Constanta. Trebuie mentionate nu in ultimul rand proiectele de cercetare colaborativa de succes desfasurate in parteneriat, atat cu INCDFM in calitate de conducator de proiect cat si ca partener cu unele din cele mai importate grupuri cu activitate in domeniul materialelor magnetice (UBB Cluj, IFT Iasi, etc.). Pe de alta parte, la nivel national INCDFM este singura locatie unde sunt studiate aliajele Heusler metamagnetice cu memoria formei.

Tema 3

In ultimii anii, integrarea cunostintelor din domeniile nanotehnologiei si medicinei au oferit posibilitatea fara precedent de a crea materiale si dispozitive, la scara nanometrica, cu potential in revolutionarea strategiilor terapeutice disponibile in prezent. Datorita cuplajului magneto-mecanic si biocompatibilitatii mult imbunatatite, aliajele feromagnetice cu memoria formei (FSMA) pe baza de Fe-Pd reprezinta materiale extrem de promitatoare pentru aplicatii biomedicale, comparativ cu materialele cu memoria formei (SMA) din clasa Ni-Ti, care s-au folosit pana acum si care prezinta deficiente la capitolul citotoxicitate.

O parte importantă din cercetările din domeniul științei biomaterialelor sunt concentrate asupra identificării sau optimizării de materiale bioactive [12-14.] în vederea dezvoltării de modele arhitecturale de proteze poroase de reconstituție/stimulare a creșterii osoase și acoperiri ceramice/vitroase fiabile pentru funcționalizarea implanturilor dentare. Cele mai promițătoare materiale bioactive sunt (i) hidroxiapatita [HA , $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$] pură și dopată și (ii) formulații speciale de sticle silicaticice (SBG, silicate bio-glass) și fosfatice (PBG, phosphate bio-glass). Prin controlarea gradului de cristalinitate și a nivelului de dopaj (în cazul HA) și a gradului de conectivitate a rețelei sticlei (în cazul SBG și PG) considerăm că devine fezabilă crearea de materiale cu bio-funcționalitate extinsă (proprietăți mecanice excelente însoțite de bioactivitate, citocompatibilitate și efect angiogenic și antimicrobian), care ar putea deschide drumul către soluții de control a mecanismului regenerării osoase și scurtarea timpului de vindecare tisulară, atractive principalilor actori din industria de profil.

Ingineria tisulară reprezintă o direcție biomedicală în plină dezvoltare care are ca scop principal refacerea țesuturilor afectate. Protezele de tip „scaffold” cu porozitate controlată din materiale bioactive (e.g. fosfați de calciu, bio-sticle) constituie o soluție fezabilă pentru regenerarea țesuturilor conjunctive dure [14]. Acestea reprezintă o alternativă la transplanturile unde are loc înlocuirea țesuturilor distruse cu altele procurate din surse de origine biologică. Producerea de proteze „scaffold” poate fi realizată prin mai multe metode „*additive layer manufacturing*”, dintre care printarea 3D rămâne cea mai atractivă principial datorită controlului precis a dimensiunii și distribuției porilor din structură, făcând posibilă și obținerea facilă de forme complicate, personalizate pacienților. Rezultate au fost raportate recent în literatura de specialitate [15-18], domeniul fiind unul efervescent cu numeroase provocări tehnologice nerezolvate, de care poate depinde transferul la nivel aplicațional.

Pe de altă parte în implantologia osoasă (ortopedică și dentară), datorită încărcărilor biomecanice mari sunt preferate materialele metalice pentru fabricarea endo-protezelor (de șold, genunchi, cot sau umăr) și implanturilor dentare. Combinarea proprietăților mecanice excelente ale materialelor metalice suport cu capacitatea osteogenică a materialelor ceramice/vitroase bioactive (de a treia generație [19]), precum hidroxiapatita dopată și bio-sticlele silicaticice și fosfatice, sub formă de strat subțire este considerată în prezent soluția optimă pentru îmbunătățirea performanțelor dispozitivelor medicale implantabile [20-22]. Proprietățile mecanice ale acoperirilor implantologice reprezintă factor critic pentru realizarea unei proteze sau implant de succes și stabilitatea acestora *in situ* pe termen lung.

O parte din materialele bio-active posedă abilitatea de a resorbi parțial (HA și SBG) sau integral (PBG) *in vivo* în mediile intercelulare și de a elibera produșii ionici constituenți [20,13,23,24.] cu potențial anti-infecțios sau terapeutic. Una dintre problemele medicinei moderne este de altfel reprezentată de identificarea de noi căi de acțiune împotriva tulpinilor microbiene rezistente la antibioticele clasice [25]. Principala provocare în dezvoltarea de acoperiri implantologice fiabile o reprezintă însă obținerea de filme subțiri cu aderență puternică la interfața strat biofuncțional ceramic/vitros – substrat metalic, modul de elasticitate și duritate compatibilizat cu cel al osului (pentru a minimiza sau chiar elimina fenomenele de stress shielding – una dintre cauzele majore ale resorbției osoase la interfața implant – țesut), și coeficient de uzură redus.

SBG permite dezvoltarea armonioasă de celule de diferite fenotipuri (nu doar osteogenice) pe suprafață sa. SBG conține predominant dioxid de siliciu (formator de rețea) dar și alți oxizi metalici (modificatori de rețea), iar prin modificarea raportului formator/modificatori de rețea, rata de solubilitate în mediul fiziologic poate suferi modificări importante [13, 21]. Astfel, straturile subțiri de SBG ar putea deschide noi perspective și în micro-electronică, ținând către aplicații în domeniul sănătății. Acest tip de dispozitive se încadrează sub titulatura generică de bio-electronică [6]. Aceasta descrie o ramură complementară a nano-tehnologiei, fiind un sub-domeniu ce își propune dezvoltarea unor dispozitive precum platformele electronice ultra-subțiri pentru intervenții chirurgicale, implanturi inteligente, senzori de diagnostic sau componente electronice bio-degradabile pentru monitorizarea parametrilor fiziologici.

Materialele de tip PZT (titanat zirconat de plumb) cu caracteristici „dure” reprezintă alegerea optimă pentru generarea de tensiuni mari pe bază de efect piezoelectric direct. Folosirea acestui tip de transformatoare piezoelectrice la generarea de tensiuni înalte pentru iluminarea de fundal pentru lampile fluorescente cu catod rece utilizate la monitoarele cu cristale lichide a dus și la succesul lor comercial. În ultimii ani accentul este pus pe realizarea transformatoarelor piezoelectrice de putere cu aplicații în energetică, spațiu, apărare și securitate. Generarea de tensiuni mari cu ajutorul materialelor piezoelectrice [26-28] are aplicații în domeniul sănătății la obținerea ozonului necesar pentru ozonoterapie precum și a

plasmelor reci care sunt folosite pentru efectul lor oxidativ ce inhibă creșterea microorganismelor. Sunt astfel generate specii pe baza de oxigen și azot încărcate pozitiv sau negativ cu rol important în sterilizare. Aplicațiile întrevăzute sunt în medicina umană și dentară, industria alimentară, modificarea proprietăților biomaterialelor, etc.

Au fost realizate teste de efect fotodinamic în culturi celulare folosind nanoparticule de TiO_2 stabilizate cu PEG. În condițiile acestor teste, suprafața nanoparticulelor de TiO_2 devine acoperită cu PEG sau/si proteine. Rezultatele au evidențiat prezența proceselor fotocatalitice. Nu există studii dedicate evidențierii și înțelegerii modului în care eficiența reacțiilor fotocatalitice/generării SRO este influențată de prezența PEG/proteine pe suprafața nanoparticulelor fotoactivate.

Nanotehnologia reprezintă astăzi un domeniu științific în plină ascensiune. Particulele de oxid de fier au atras atenția asupra lor de câteva decenii datorită proprietăților pe care le posedă la scară nanometrică fiind utilizate cu succes în mai multe domenii industriale [29-30]. Astfel, folosite inițial pentru stocarea informației, particulele de oxid de fier la scară nanometrică au cunoscut noi aplicații sub forma de dispersii coloidale magnetice numite ferrofluide în tratamentul și diagnosticarea multor boli (cancere, boli autoimune sau infectioase). Dezvoltarea acestei noi tehnologii reprezintă o provocare majoră de sănătate publică [31-33]. S-a încercat folosirea nanoparticulelor magnetice ca agenți de contrast în RMI, pentru tratarea cancerului prin hipertermie, pentru imobilizarea enzimelor, pentru eliberarea controlată de medicamente [34,35]. În ultimii ani, s-a propus utilizarea acestora în livrarea de agenți antitumorali în terapiile oncologice. În prezent, obținerea de concentrații optime de medicamente active la nivelul zonelor vizate nu poate fi controlată foarte bine, întrucât o parte din agentul antitumoral este de obicei captată de țesutul sănătos. La nivel național și internațional există studii în domeniu atât pe plan național cât și internațional, însă până în prezent nu s-a raportat existența unui tratament chimioterapic care să poată fi concentrat doar la nivelul tumorii, fără a exercita efecte adverse asupra altor organe și țesuturi din vecinătate. În acest context, dezvoltarea de noi biomateriale pe baza de nanoparticule de oxid fier utilizate ca și vectori de direcționare și livrare ai agenților antitumorali vor putea avea un impact considerabil în tratamentul pacienților cu neoplasme atât în stadiul incipient cât și în stadiul avansat.

Problema evaluării corecte a stabilității unui implant dentar este importantă și actuală. Principala metodă în prezent este fie una pur empirică de tipul împingerii ușoare a implantului cu un obiect rigid, urmată de ciocanirea lui și analizarea sunetului produs 'după ureche', fie una radiografică, cu avantajele și dezavantajele bine-cunoscute.

În ceea ce privește domeniul de bioeconomie, situația actuală se prezintă astfel: Membranele fibroase proteice ce pot fi recoltate din coji de ou (considerate multă vreme unele dintre cele mai abundente deseuri în industria alimentară) au devenit extrem de atragătoare pentru utilizarea ca bio-sabloane în prepararea de nanostructuri de oxizi metalici [36]. Membranele prezintă următoarele caracteristici speciale: porozitate ridicată, suprafață mare, capacitate mare de absorbție, permeabilitate bună, rezistență mecanică bună, stabilitate termică și flexibilitate. În ultimii ani, atenția cercetătorilor s-a focalizat pe găsirea unor abordări vizând păstrarea membranei (și implicit a proprietăților acesteia) în timpul sintezei nanostructurilor. Astfel, au fost obținute membrane acoperite cu nanoparticule metalice, membranele funcționalizate având aplicații de tip substraturi active SERS, pansamente în vindecarea rănilor, etc. [37]. ZnO este unul dintre cei mai studiați semiconductori datorită proprietăților sale optice și electrice [38]. Până în prezent, o singură lucrare a fost raportată privind acoperirea membranelor fibroase proteice cu filme de ZnO prin depunere de straturi atomice, asistată de plasmă [39], o tehnică ce utilizează echipamente complexe și scumpe. În comparație cu această metodă, depunerea auto-catalitică a ZnO [40] prezintă următoarele avantaje: i) implică costuri scăzute; ii) nu necesită instrumente sofisticate și iii) acoperirea este uniformă (cu aderență bună) pe suprafețe mari indiferent de forma obiectelor ce urmează a fi acoperite. În acest context, depunerea auto-catalitică a ZnO pe membrane fibroase proteice recoltate din coji de ou ar reprezenta o alternativă ușoară, ieftină și scalabilă de funcționalizare, ce ar permite păstrarea structurii tridimensionale poroase a membranelor, extinzând în acest mod aplicațiile acestora în domeniul fotocatalizatorilor, senzorilor chimici, etc.

Unul dintre cei mai studiați polimeri conductori electroactivi, polipirrolul a fost utilizat în dezvoltarea de actuatori datorită capacității sale de a se contracta/dilata la aplicarea unor stimuli externi (curent electric, umiditate, temperatură, etc.) [41, 42]. Cele mai multe configurații de actuatori presupun depunerea electrochimică a polimerilor electroactivi pe substraturi flexibile acoperite cu un metal (Au , Pt , etc.) și folosirea unor benzi adezive pentru exfolierea filmelor de polimeri conductori depuse pe substraturile metalizate [43, 44]. Recent, membranele fibroase proteice ce pot fi recoltate din coji de ou au generat un

interes deosebit, datorita biocompatibilitatii acestea avand un potential urias in utilizarea ca bio-sabloane in obtinerea unor materiale cu aplicatii in biomimetica (schelete pentru regenerarea tisulara, suporturi pentru eliberarea controlata de medicamente, comprese hemostatice si pansamente in vindecarea ranilor, implanturi artificiale, etc.). Pana in prezent, doar doua lucrari au fost raportate privind acoperirea membranelor fibroase proteice cu filme de polipirol [45, 46]. In acest context, depunerea electrochimica a polipirolului pe membrane fibroase proteice recoltate din coji de ou ar reprezenta o abordare interesanta de fabricare a unor actuatori versatili, ce ar putea fi utilizati in diferite medii (lichid, aer sau atmosfera cu umiditate controlata).

Oxidul de zinc este utilizat în multe domenii industriale, precum dispozitivele de emisie a luminii UV, celule solare, foto catalizatori, senzori de gaze, acoperiri și vopsele, în industria cosmetică și farmaceutică. Particulele de oxid de zinc pot fi produse prin mai multe tehnici cum ar fi precipitarea chimică, sol-gel, descompunerea termică și sinteza hidrotermală. Interesul pentru chimia „verde” a dus la dezvoltarea unei abordări ecologice pentru sinteza structurilor de oxid de zinc. Plantele și/sau extractele acestora oferă o cale de sinteză biologică a mai multor nanoparticule metalice care sunt mai ecologice și permit o sinteză controlată cu o dimensiune și o formă bine definite. Enzimele, extractul de frunze și bacteriile joacă un rol vital în sinteza verde a nanoparticulelor de oxid de zinc. De asemenea pentru sinteza nanoparticulelor de Ag sunt și metode clasice însă ele sunt costisitoare, necesită energie, presiune, implicând multe etape, substanțe toxice care pot fi absorbite pe suprafața lor făcând dificilă aplicabilitatea lor în domeniul medical [47]. Nanoparticulele de argint au atras întotdeauna atenția comunității științifice, datorită proprietăților lor antitumorale [48], antioxidante și antimicrobiene [49,50]. În ultimii ani, o atenție deosebită a fost acordată metodelor ecologice pentru sinteza ecologică a nanoparticulelor de Ag utilizând extracte de plante care oferă numeroase avantaje: simplitate, rapiditate, compatibilitate pentru aplicațiile biomedicale (deoarece nu folosesc substanțe chimice toxice), eficiența costurilor, fito-compuși (proteine, carbohidrați, flavonoide, fenoli etc.). În plus, plantele sunt preferate în sintezele de nanoparticule de Ag datorită disponibilității, costului redus, abundenței în natură, reziduurilor de legume care pot fi reciclate și astfel costurile de producție sunt reduse la minimum. Plantele sunt importante surse de compuși bioactivi cu un larg potențial terapeutic. În ultima perioadă, materiale fito au atras atenția din ce în ce mai mult asupra lumii științifice deoarece ele combină beneficiile plantelor cu alte componente obținându-se materiale cu proprietăți îmbunătățite și aplicabilitate extinsă. Lupta împotriva cancerului și a rezistenței la antibiotice sunt două dintre cele mai importante provocări cu care se confruntă astăzi sănătatea umană. Prin urmare, sinteza structurilor ZnO dopate cu Ag este o modalitate eficientă de a construi compozite cu proprietăți îmbunătățite.

Au fost realizate teste de efect fotodinamic în culturi celulare folosind nanoparticule de TiO_2 stabilizate cu PEG. În condițiile acestor teste, suprafața nanoparticulelor de TiO_2 devine acoperită cu PEG sau/si proteine. Rezultatele au evidențiat prezenta proceselor fotocatalitice. Nu există studii dedicate evidențierii și înțelegerii modului în care eficiența reacțiilor fotocatalitice/generării SRO este influențată de prezenta PEG/proteine pe suprafața nanoparticulelor fotoactivate.

Dezvoltarea de tehnologii, realizarea și caracterizare de suprafețe nanostructurate sau acoperiri multistrat de tip metasuprafețe (MTS) pentru componente optice compacte pe baza de materiale plasmonice cu caracteristici functionale semnificativ îmbunătățite în aplicații optoelectronice: superlentile plasmonice pentru imagistica de înaltă rezoluție, senzori biochimici cu rezonanțe plasmonice de suprafață (SPR) și celulele solare de mare eficiență și fiabilitate.

Se intenționează să se dezvolte un dispozitiv pentru analiză rapidă a distribuției simultane în funcție de masă și sarcină a aerosolilor salini emiși de inhalatoare sau difuzoare. Dispozitivul va fi brevetat și promovat, iar testările diferitelor variante constructive de inhalatori vor fi corelate cu eficacitatea medicală a procedurii de inhalare folosind aceste dispozitive.

Materialele naturale sau inspirate de natură, incluzând ADN, ARN și nucleobazele, deschid perspectiva primelor forme biodegradabile de circuite/dispozitive electronice care se degradează după expirarea timpului de viață.

ADN-ul și ARN-ul sunt materiale unice cu aplicații în nanotehnologie datorită structurii lor care permite, prin utilizarea unor secvențe de baze ale acizilor nucleici, și folosirea proprietăților de "recunoaștere" ale bazelor componente, determinarea modului de asamblare a unor unități într-o structură predefinită [51,52].

În acest context, o atenție specială a fost acordată studiului proprietăților bazelor azotate ale ADN-ului și ARN-ului și a proprietăților interfetei dintre acestea și diferiți semiconductori organici și anorganici.

Bazele acizilor nucleici (BAN), purinele (adenina și guanina) și pirimidinele (citozina, timina și uracilul) sunt părți ale unităților componente ale biomoleculilor.

În ciuda acestui interes crescut legat de proprietățile ADN-ului și ARN-ului și componentelor lor privind proprietățile de transport ale purtătorilor de sarcină și morfologia de împachetare, date privind proprietățile electronice ale bazelor acizilor nucleici în faza condensată sunt puține, iar pentru unele dintre nucleobaze lipsesc.

Pe de altă parte, transportul purtătorilor de sarcină în biomolecule este un proces foarte important relevant pentru multe funcții și procese biologice [53]. Transferul purtătorilor de sarcină este corelat de asemenea cu o serie de deteriorări la nivelul lanțului de ADN și cu posibilitatea apariției unui mecanism de "reparație" [54,55], evidențiindu-se o corelație între proprietățile de transport a purtătorilor de sarcină și locul unde apar mutații patogene.

INCDFM posedă o expertiză bogată în fabricarea de biomateriale ceramice și/sau vitroase și utilizarea lor pentru biofuncționalizarea implanturilor metalice prin metoda pulverizării în câmp magnetron în regim de radio-frecvență. Deși în prezent și alte instituții din România încep să se implice activ în acest domeniu, INCDFM rămâne instituția care a deschis calea cercetărilor la nivel național [56- 59]. Prin eforturi susținute, de la concept și preparare până la testare biologică complexă, INCDFM a reușit în premieră națională definirea unei rețete tehnologice de fabricare de acoperiri implantologice de hidroxiapatită carbonată cu aderență ridicată pentru osteointegrarea meșelor de titan craniene [60]. Totodată menționăm, ca în INCDFM au fost realizate și studii de pionerat la nivel internațional privind fezabilitatea fabricării de straturi de bio-sticlă silicatică cu aderență ridicată și bioactivitate mare prin metoda mai sus menționată [61-62]. Rezultatele testelor mecanice și biologice *in vitro* au permis obținerea de curând a primului demonstrator: un implant dentar tip șurub funcționalizat acoperire de bio-sticlă silicatică prin metoda pulverizării în câmp magnetron în regim de radio-frecvență [63]. Acest subiect de cercetare a progresat și se găsește în prezent în etapa testării *in vivo* pe model animal. Fabricarea de filme subțiri de bio-sticlă fosfatică va reprezenta o premieră la nivel național. Stabilirea rețetelor de materii sursă (cerneluri și paste) bio-active urmată de realizarea prin printare 3D unor structuri tip proteze „scaffold” pilot, alături de evaluarea ratei de solubilitate în mediu fiziologic și a proprietăților electrice ale straturilor subțiri de bio-sticlă în vederea integrării în micro-dispozitive electronice cu aplicații în biomedicină, vor constitui la rândul-le premiere la nivel național.

În România sunt produse și caracterizate doar în cadrul INCDFM materiale piezoelectrice de tip „dur” din care sunt realizate traductoare de ultrasunete de putere pentru beneficiari economici (MEFIN Sinaia, HIDROJET S.A. Breaza, ELJ Automotive S.A. Titu, ELENA MODCOM SRL). Compozițiile de material piezoelectric trebuie adaptate pentru fiecare aplicație în parte. Transformatoare piezoelectrice pentru generarea de tensiuni înalte cu aplicații în domeniul sănătății nu au fost încă realizate la noi în țară. INCDFM dispune în acest moment de echipamentele necesare pentru obținerea și caracterizarea acestor tipuri de elemente active. Echipamentele de care este nevoie pentru realizarea acestor aplicații (mori cu bile, cuptoare de temperatură ridicată, surse de tensiune înaltă, echipamente de caracterizare) pecum și necesitatea operării lor de către personal calificat au necesitat investiții mari și susținute de unde și dificultatea abordării acestui domeniu de către firmele private din țara noastră.

Studii care indică prezenta efectelor fotocatalitice în condiții *in vitro* în absența PEG (chiar și în absența iradierii UV dedicate) au fost realizate prin colaborări dintre INCDFM și instituții partenere [64-66]. La nivel național, nu au fost identificate studii publicate realizate în contextul propus de proiect.

În țară, au fost realizate încercări de funcționalizare covalentă a nanotuburilor de carbon în scopul utilizării acestora în procese de eliberare controlată a unor medicamente. Problema este legată de această legare covalentă care nu permite o eliberare rapidă a medicamentelor, cum este cazul cisplatinului în tratamente medicale ale bolilor cancerigene.

Scopul acestui studiu a fost transformarea grupelor carboxilice existente pe suprafața nanotuburilor (atât SWNT, cât și MWNT) în ioni carboxilat prin reacția cu diferite carbodiimide, urmată de amidare *in situ* cu monoamine, în vederea utilizării lor ca agenți de ranforsare în nanocompozite pe baza de rășină epoxidică. Activitatea din ultimul timp a cercetătorilor din domeniu s-a axat pe demonstrarea utilității chimiei de tip acilare-amidare pentru legarea covalentă a grupărilor amino de cele carboxilice. Eficiența activării prin chimia carbodiimidelor este foarte puțin investigată pentru obținerea de agenți de ranforsare pentru matrici epoxidice ci mai mult în obținerea de biomateriale. Pentru reducerea timpului de reacție, menținând o conversie relativ ridicată a grupelor carboxilice, s-a utilizat activarea cu N-etil-N'-(3-dimetilaminopropil) carbodiimida (EDC) și N-hidroxi succinimida (NHS) în cazul MWNT, respectiv

activarea cu N,N'-diciclohexil carbodiimida (DCC) în cazul SWNT, urmata de reactia de amidare cu diferite amine.

MTS reprezinta o analogie bidimensionala (2D) a metamaterialelor (MTM). De fapt, MTS sunt straturi subtiri structurate sau cu incluziuni metalice/semimetalice mai mici decat lungimea de unda dispuse regulat, astfel incat sa se obtina proprietati fizice adaptate la cerere [67,68]. O suprafata arbitrara cu grosime mai mica decat lungimea de unda poate fi desemnata ca MTS, chiar daca contrapartea ei tridimensionala de tip MTM nu poate fi riguros definita. MTS difera de MTM prin faptul ca opereaza asupra undelor electromagnetice mai ales prin exploatarea conditiilor la limita sau de interfata decat prin parametrii de volum caracteristici.

În ultimii ani, s-a pus în evidență că aerosolii salini cu efecte benefice asupra stării de sănătate a tractului respirator conțin nanoparticule încărcate. În particular, în ultimii ani s-au dezvoltat dispozitive speciale pentru analiza distribuției nanoparticulelor emise în funcție (separat) de masă (m) și de sarcină (q) [69-71]. Aceste rezultate sunt afectate de ambiguitatea faptului că orice spectrometru electrostatic determină distribuția în funcție de m/q . În lucrările [69,70] s-a propus un dispozitiv (bipolar charge analyzer, BOLAR) care analizează secvențial depunerea de aerosoli de diferite dimensiuni prin mai multe filtre micrometrice, cărora li se măsoară sarcina datorată aerosolilor depuși; ulterior, prin spălarea acestora, se determină și masa depusă, deci se realizează un fel de distribuție în funcție de masă și sarcină. Acest dispozitiv pare a fi avut un oarecare succes comercial, în ciuda faptului că analiza este cam greoaie și imprecisă.

În cadrul INCDFM au fost realizate studii preliminare pentru investigarea proprietatilor unor heterostructuri bazate pe citozina si guanina. Filme subtiri din aceste materiale au fost preparate prin evaporare termica in vid pe substrat flexibil (PET, Mylar) si au fost apoi investigate din punct de vedere optic (UV-VIS, fotoluminescenta), morfologic (AFM, SEM), electric (masuratori I-V). Efectul unui strat tampon, pe baza de anhidrida maleica, plasat intre electrodul conductor transparent si stratul de guanina sau citozina, asupra proprietatilor optice si electrice ale heterostructurilor a fost de asemenea investigat.

Tema 4

Situatia actuala va fi prezentata pe principalele domenii aplicative avute in vedere:

Energie-Mediu: Cercetarile in domeniul celulelor solare continua peste tot in lume, scopul principal fiind de a obtine o eficienta de conversie cat mai mare la un pret de cost cat mai redus.

În ceea ce privește celulele solare pe baza de semiconductori traditionali, la nivel national exista preocupari directionate pe obtinere de pulberi si corp solid de pamanturi rare (cu si fara dopaje) pentru proprietati optice [grig1, grig2], insa rareori se pune problema utilizarii lor in conditii reale pe celule solare.

În ceea ce privește celule solare bazate pe compusi organici sau pe structuri hibride se constata ca:

- *La noi în țară*, INCDFM deține recordul celor mai eficiente celule solare cu perovskiți hibridi în configurație standard, ajungând la valoarea de peste 15 % [leon2], reprezentând un record pentru România. INCDFM este singurul institut de cercetare ale cărui preocupări în acest domeniu sunt comparabile cu cercetările la nivel internațional. Pană în prezent, la nivel national nu exista alte grupuri cu preocupări similare pentru fabricarea de celule solare cu perovskit hibrid, cu atât mai puțin încapsularea lor.
- În cadrul colectivului din INCDFM au fost realizate studii preliminare pentru obtinerea de straturi mixte pentru structuri de celula solara continand ca donori compusi arilenvinilenici cu structura in stea [raso11], polimeri pe baza de arilena [raso1] si compusi arilenvinilenici cu structura liniara [raso12], sau donori pe baza de oligoazometine [raso13]. Ca acceptori a fost utilizata fullerena C60 sau un derivat mai usor solubili ai acesteia, PCBB. Aceste straturi mixte au fost depuse prin folosirea metodei de depunere laser pulsata asistata de matrice (MAPLE). Straturile depuse au fost caracterizate prin metode optice (transmisie UV-VIS, fotoluminescenta), difracție de raze X, SEM, AFM. Proprietatile electrice ale structurilor realizate între un electrod de ITO si unul metalic au fost investigate prin trasarea caracteristicilor I-V la întuneric si iluminare. Au fost realizate de asemenea studii privind obtinerea unor straturi din semiconductori organici din solutie prin metoda spin coating [raso14,raso15].
- La nivel national tehnica de depunere MAPLE a fost folosita pentru a depune heterostructuri organice pe baza atata de compusi cu molecula mica cat si polimeri [soco8-soco10]. Aceste

incercari apartin grupului din INCDFM din care fac parte si au fost facute in colaborare cu un colectiv din INFLPR si unul din ICMPP Iasi. S-a demonstrat ca este o tehnica adecvata de a depune astfel de materiale. In general s-a pus in evidenta aparitia efectului fotovoltaic in heterostructurile realizate.

In ceea ce priveste descompunerea apei, si plecând de la premisele prezentate mai sus, in INCDFM s-a proiectat și preparat un sistem fotocatalitic de tip NiO-ZnO/TiO₂ capabil să descompună apa sub iradiere cu lumină UV și să producă 17 mmoli H₂ g⁻¹h⁻¹, o eficiență cu aproape 1000 de ori mai mare decât cea obținută cu ajutorul celui mai cunoscut fotocatalizator, TiO₂ Evonik P25. [neat1]

Un alt aspect important in domeniul energetic il constituie stocarea energiei excedentare, care se poate realiza in baterii, super-capacitori sau in sisteme pe baza de hidrogen. Bateriile standard folosite actualmente functioneaza pe baza ionilor de Li⁺ care sunt transportati între electrozi printr-un electrolit lichid. Bateriile solide, având atât electrozii cât și electrolitul în fază solidă, prezintă o varietate de avantaje, printre care: o mare densitate de energie care poate fi stocată, miniaturizarea cu mai mare ușurință, absența curenților de scurtcircuitare, absența unui schimb abrupt cu variațiile de temperatură, raportul ridicat putere/greutate și tendința de a avea o durabilitate mai mare. Necesitatea extinderii producerii lor la scară industrială induce și nevoia studiului metodelor de preparare și a principiilor de funcționare în sisteme model.

Momentan, în INCDFM o linie de cercetare adresează materialele pentru generarea, conversia, transportul și stocarea de energie. În particular, în ceea ce privește stocarea de energie, se studiază materiale compozite și nanocompozite [borc1, borc2] cât și heterostructuri [borc3] pentru realizarea de condensatori și supercondensatori. Studiul la nivel nanometric a cristalelor ionice, ca mediu electrolitic în vederea producerii bateriilor solide constituie o temă paralelă în acest domeniu în institut, neconcretizată încă nici la alte institute de cercetare din România, după cum arată căutarea rezultatelor publicate în reviste ISI. În institut există experiența și infrastructura necesară pentru investigarea standard a proprietăților a diferite suprafețe și interfețe [borc4, borc5] și prin microscopie electronică de efect tunel a potențialului de suprafață [borc6] și a acțiunii câmpului electric la scară nanometrică [borc7]. De asemenea, în INCDFM există și un grup a cărui activitate se concentrează pe sinteza de materiale pentru stocarea hidrogenului, cu rezultate în domeniul sistemelor compozite de hidruri, borohidruri și amiduri de Li și Mg.

Privind problemele de mediu, în România, studii privind fitoremedierea (folosirea plantelor pentru decontaminarea solului) au fost efectuate la Universitatea Tehnică Gheorghe Asachi din Iași (Departamentul de Inginerie și Managementul Mediului) sau la Universitatea din București (Facultatea de Geologie și Geofizică). O echipă de la Universitatea Babeș-Bolyai din Cluj Napoca (Departamentul de Biologie Moleculară și Biotehnologie) a folosit bacterii halofile pentru decontaminarea solului de metale grele. Cercetători de la Institutul de Fizică și Inginerie Nucleară Horia Hulubei din Magurele au raportat folosirea unor tulpini de bacterii pentru îndepărtarea Cu din solul contaminat din perimetrul Copsa Mică. Nu au fost identificate, folosind Web of Science, echipe de cercetare care să studieze biomineralizarea metalelor grele din apă sau sol folosind cianobacterii sau foraminifere bentonice.

TIC, Spațiu-Securitate: În țară există interes pentru dezvoltarea a diferite tipuri de senzori cu aplicații în spațiu și securitate sau pentru dezvoltarea de materiale și structuri cu potențial de aplicații în tehnologia informației și comunicații. Totuși, sunt unele domenii în care INCDFM deține priorități importante la nivel național, cum ar fi în domeniul senzorilor de IR, de gaze, de radiații ionizante sau în domeniul materialelor dielectrice pentru comunicații fără fir.

În INCDFM există interes pentru dezvoltarea de materiale feroelectrice fără plumb, prin metode fizice și chimice. În mod special s-a pus accent pe realizarea filmelor subțiri de bună calitate prin metode fizice (depunere în fascicul laser pulsant (PLD), magnetron sputtering) și s-au obținut rezultate importante, corelate cu o serie de proprietăți ale acestora [bote3][bote6]. În studiile realizate până acum în țara noastră, s-a pus accent pe partea de obținere a structurilor, ci nu pe relația dintre anumite proprietăți care să ducă la dispozitive cu caracteristici îmbunătățite. Au fost menționate în studiile efectuate și aplicații specifice pentru aceste materiale. Deși s-au făcut progrese în controlul răspunsului piroelectric prin anumite proprietăți ale structurilor, există totuși aspecte puțin tratate în legătură cu piroelectricitatea, ca de exemplu influența curenților de scurgere sau a contactelor metalice asupra semnalului.

În ceea ce privește alte tipuri de fotodetectori, în INCDFM există experiența în folosirea tehnicii de sinterizare în plasmă de scântei (Spark Plasma Sintering - SPS) pentru diverse materiale și în particular pentru obținerea de pastile calcogenice cristaline (Ga₂S₃, Ga₂S₃:Eu, Ga₂S₃:Er, Ga₂S₃:Gd, EuS, Er₂S₃,

Gd₂S₃) [sava1-sava3]. In general, TiO₂ este studiat pentru proprietatile de fotocataliza care il fac foarte potrivit pentru aplicatii de mediu (suprafete cu autocuratare sub influenta radiatiei solare, purificarea apei de consum etc.) [slav9]. In domeniul celulelor solare organice, acesta este studiat sub forma de nanopulberi si mai putin ca material compact sub forma de film subtire [slav10]. Grupul din INCDFM care propune tema are experienta in obtinerea de structuri cu NC de Ge inglobate in oxizi cu proprietati fotoelectrice pentru aplicatii de senzori si respectiv cu proprietati de memorie pentru aplicatii de memorii nevolatile [slav11, slav12, slav13].

In domeniul senzorilor de gaze, in afara de INCDFM, se cunosc doar cateva grupuri care au preocupari in acest domeniu. Sunt grupuri in Bucuresti la IMT, ICF si INFLPR, iar la Timisoara la ICT-AR. In INCDFM exista preocupari cu traditie [lori3] pentru dezvoltarea de materiale sensibile la gaz metan, monoxid de carbon, oxizi si suboxizi de azot, precum si alte gaze de interes specific. In grupul nostru ne-am indreptat atentia doar relativ recent spre senzori de gaze [lori4,lori5], dar cu materiale noi, altele decat cele clasice pe baza de oxizi de staniu. In INCDFM exista si experienta in folosirea tehnicii de depunere straturi subtiri prin metoda Langmuir Blodgett pentru materiale moi, organice folosite ca ca matrita purtatoare pentru nanaotuburi de carbon si metaloporfirine.

In ceea ce priveste telecomunicatiile fara fir, pe plan intern, au fost realizate o serie de dispozitive de tip antene de unde milimetrice la Institutul de Microtehnologii. Investigatiile in domeniul THz s-au restrans la spectroscopia de THz in domeniu temporal (INCDFM, INFLPR). Se impune propunerea unor solutii pentru frecvente mai inalte.

Domeniul memoriilor pentru tehnica de calcul sau pentru automatizari si control este foarte vast. Din pacate, lipsa unei industrii de profil a diminuat interesul pentru studii in aceasta directie. Totusi, prezenta in Romania a unor firme importante in productia de componente electronice (Intel, IBM, Honeywell, Thales, etc.) a dus la o revigorare a cercetarilor in special in domeniul memoriilor nevolatile dar si in domeniul dispozitivelor emitatoare de lumina (LED).

Memorii nevolatile: Capacitorii MOS au fost realizati in INCDFM folosind NC de Ge in matrici de SiO₂ si HfO₂ [pala11-pala14]. Nu avem cunostinta de astfel de preocupari in tara. In ceea ce priveste memoriile nevolatile bazate pe feroelectrice, in ultimii ani, in INCDFM a existat o preocupare majora pentru studiul structurilor de filme subtiri epitaxiale cu proprietati feroelectrice. Acestea au fost analizate atat din punct de vedere structural cat si a proprietatilor dielectrice, feroelectrice [boni1]–[boni5], piroelectrice [boni6]–[boni8] ce stau la baza principiilor de functionare a unui numar mare de aplicatii. Studiile realizate pana acum au aratat ca exista o relatie stransa legata intre modificarile structurale si diferentele obtinute in masuratorile electrice a aceluiasi tip de structura crescuta pe substraturi diferite [boni2] sau folosind electrozi de spate/straturi buffer diferite [boni9].

Alte materiale pot fi luate in considerare pentru o posibila utilizare in dispozitive de memorie. Pe plan national, in INCDFM s-a studiat anterior cazul semiconductorilor magnetici diluati FeGe si MnGe, publicand doua articole si un capitol de carte [lung11-lung13]. Deși datele din literatură sugerau că în cazul depunerilor Mn pe substrat Ge menținut la temperaturi de peste 200 °C manganul segregă în compuși intermetalici feromagnetici precum Mn₅Ge₃, Mn₁₁Ge₈, nerămânând Mn dispersat atomic în matricea gazdă care să manifeste un semnal feromagnetic, studiul nostru a reușit să arate prin măsurători comparate de spectroscopie de fotoelectroni, măsurători magnetice, imagini de difracție de electroni lenți și imagini de microscopie electronică de transmisie că semnalul feromagnetic înregistrat pe probele depuse pe substrat încălzit la min. 250 °C provine în cea mai mare parte de la manganul aflat încă în mare parte ca dispersat atomic în matricea Ge.

In ultimii ani materialele si sistemele 2D au inceput sa fie intens studiate pentru aplicatii in electronica. Tehnica MAPLE a fost dezvoltata de US Naval Research Laboratory la sfarsitul anilor '90, existand si o experienta a grupurilor din Romania si a cercetatorilor romani [logo1-logo7]. De asemenea in prezentul grup de lucru exista o experienta stiintifica concretizata printre altele de referintele [logo8-logo15]. Există preocupări privind sinteza grafenei la INCD Microtehnologie și la INCDFM, în special folosindu-se depunerea chimică din vapori (CVD). Pentru realizarea de straturi grafenice pe materiale semiconductoare sau izolatoare, în special pe oxizi complecși, metoda CVD nu poate fi aplicată, întrucât implică încălzirea substratului la temperaturi la care un substrat cu o structură mai complexă (de exemplu, un perovskit) se degradează. De aceea, se intentioneaza implementarea metodei „carbon molecular beam epitaxy”, iar pentru aceasta trebuie dezvoltat un evaporator cu bombardament electronic de putere foarte ridicata, intrucat se cunoaste faptul ca acest material este cel mai greu de evaporat.

Acoperiri pentru aerospațiale: Pe plan intern folosirea structurilor de bariera termica a inceput inca din anii 70 prin utilizarea tehnicilor APS si mai apoi a tehnicii HVAF in anii 90 la nivel de teste de laborator in cadrul INCREST, si mai apoi INCAS, TurboMecanica Bucuresti. INCDFM a participat in perioada 2013-2015 la doua proiecte ROSA coordonate de INCAS si Turbomecanica legate de problematica structurilor TBC. In proiectul ATLAS s-a studiat problemele legate de stratului de acrosaj dintre ceramica YSZ si substratul de eproвете din superaliaj privind: a) morfologia, compozitia si structura acestuia inainte si dupa ciclari termice prin tehnici de SEM-EDS si TEM; b) dinamica proceselor de oxidare a prin analiza XRD. In cadrul acestui proiect depunerile au fost efectuate la SC Plasmajet SA. In cadrul INCDFM in perioada 2016-2017 a fost achizitionat si instalat un sistem de depunere in jet de plasma de tip APS cu care se intentioneaza a continua cercetarile incepute in cadrul proiectelor ROSA.

Patrimoniu: Arheometria este un domeniu de cercetare științifică care se ocupă de caracterizarea materialului arheologic din punct de vedere cantitativ cu metode fizico-chimice. In România ultimilor 15 ani a crescut semnificativ interesul față de investigațiile arheometrice mai ales in cadrul colaborărilor cu parteneri externi, grație dotărilor cu aparatură de ultimă generație a laboratoarelor de specialitate [secu1]. Toate aceste analize și rezultate au însă un caracter „autonom”, neexistând deocamdată propuneri de integrare și de interconectare a datelor obținute pe epoci și regiuni. Una din metodele de baza in stabilirea cronologiilor in arheologie si geologie, in particular in domeniul de varste neacoperit de datarea cu carbon este metoda termoluminescentei [secu2]. Aceasta se bazeaza pe acumularea in timp a defectelor de iradiere in rețeaua cristalina a graunțelor de minerale (cuart, feldspati, etc.) datorita iradierii naturale.

In institut exista expertiza in studiul efectelor iradierii in materiale folosind aceasta metoda si aplicatii: dozimetrie de radiatii, detectia alimentelor iradiate, datarea sedimentelor etc. [secu3-secu6] si chiar extragerea de noi informatii asupra artefactelor arheologice precum icoanele [secu7]. In plus, in institut exista o excelenta baza materiala (echipamente performante) si expertiza inalta relative la caracterizarea morfologica, optica si structurala a diverselor materiale solide [secu8-secu11]. Toate aceste rezultate au deschis posibilitatea de a putea realiza un studiu complet si complex folosind o gama larga de analize fizico-chimice asupra ceramicii și celorlalte structuri preistorice de lut ars: structurala (analiză XRD), morfologice (microscopie SEM-analiză elementală și optică), analiză termică (DTA/TG), spectroscopie Raman, termoluminescență. Astfel, pe langa interpretarea (datarea) in context arheologic se vor obtine date complexe si complete (compoziția chimică, structura materialelor etc.) care ulterior vor fi integrate într-un tablou mai larg, ce va permite concluzii viabile cu privire la evoluția, constantele și particularitățile proceselor tehnologice de realizare a ceramicii și celorlalte structuri de lut ars. Toate aceste informatii vor fi incluse (sau adaugate) in baze de date ce vor constitui un instrument de lucru pretios pentru oamenii de stiinta (istorici, arheologi etc) si cu impact important in lumea științifica.

în străinătate:

Tema 1

Materialele topologice sunt identificate si clasificate cu ajutorul invariantilor topologici, iar un astfel de invariant este conductanta Hall [50]. Mai mult, simetriile structurilor studiate conduc la clasificarea acestora in zece tipuri de sisteme cu tranzitii de faza topologice [51]. Recent, prin studiul tranzitiilor de faza topologice s-a observat ca astfel de faze pot sa existe si in structuri 2D si 3D care nu prezinta gap in spectrul energetic. Aceste materiale se numesc semimetale topologice [52,53] si sunt caracterizate prin prezenta in structura de benzi a doua sau mai multor puncte de contact intre banda de valenta si cea de conductie (in spatiul momentului cristalin k). In jurul acestor puncte sistemul este descris de un Hamiltonian Weyl. Pentru ca aceste puncte de contact intre benzi sa apara in spectrul energetic al unui semi-metal Weyl trebuie ca sistemul sa prezinte rupere de simetrie la inversia temporală sau la inversia spatiala [54]. Masuratorile de spectroscopie de fotoemisie au evidentiat comportamentul de semi-metal Weyl pentru materialul TaAs [55]. Acest material a fost studiat teoretic si propus experimental ca prezentand o asemenea faza topologica [56,57].

Mecanismul de inversie a structurii de benzi in izolatorii topologici (IT), este legat de cuplajul spin-orbita (CSO) suficient de puternic pentru a ridica degenerarea benzilor. Contributia CSO este relevanta pentru materiale cu Z mare, motiv pentru care confirmările unor izolatori topologici graviteaza in jurul elementelor Hg, Bi, Ta, in compusi cum sunt HgTe, $Hg_xCd_{1-x}Te$, $Bi_{1-x}Sb_x$, Bi_2Se_3 , Bi_2Te_3 , Sb_2Te_3 . Pornind de la observarea efectului Hall cuantic de spin [58], intelegerea mecanismului a fost mai apoi extinsa la izolatorii topologici 2D: grafene [59], heterostructuri HgTe/CdTe [60] si apoi 3D [61]. Metoda ARPES este un ingredient esential pentru confirmarea ca sistem de tip izolator topologic in majoritatea

cazurilor in care acestea sunt localizate la suprafete, datorita limitarilor asociate adancimii de probare in cazul experimentelor de fotoemisie [62-69].

Fosforena este unul din materialele 2D care a atras atentie incepand cu 2014 [70]. Progresul inregistrat in ultimii 3 ani a vizat: i) obtinerea pe scara larga a monostraturilor, bistraturilor si a multistraturilor de fosforena prin exfolierea cristalului de fosfor negru in diferiti solventi precum N-metil-2-pirolidinona, 2-propanol, ciclopentanona, benzonitril, dimetilformamida, etc. [71]; ii) determinarea benzii interzise, care poate varia intre 0.3 eV - in cristalul bulk si 2 eV, functie de numarul de straturi ale fosforenei [72]; iii) raportarea spectrelor de fotoluminescenta ale straturilor de fosforena, care prezinta benzi de emisie in domeniul spectral 800-1600 nm, a caror pozitie variaza cu numarul de straturi de fosforena [73]; iv) evidentierea unui comportament anizotrop al modurilor vibrationale active in spectroscopia Raman A_{1g} (362 cm^{-1}), B_{2g} (439 cm^{-1}) si A_{2g} (466 cm^{-1}) functie de orientarea cristalografica a probei la unghiuri de rotatie diferite [74], configuratia de masurare edge and top view [75], grosimea straturilor, temperatura si lungimea de unda de excitare [76, 77] si v) raportarea unor calcule DFT privind grefarea monostraturilor de fosforena cu grupari functionale de tip oxi (=O) sau imina (=NH) [78].

Incepand cu 2016 dispersarea fosforenei a avut loc in matrici macromoleculare de tipul polistirenului [79] si copolimerul bloc polistiren poli metilmetacrilat [80] prin metode chimice. Pe masura ce cercetarea in grafena s-a aprofundat, domeniul a inceput sa se extinda pentru a cuprinde si alte materiale 2D cum ar fi nitrura de bor (BN) [81], dicalcogenuri ale metalelor de tranzitie (TMD) [82], oxizi ai metalelor de tranzitie (TMO) [83], sulfura de galiu (GaS) [84], fosforena [85], etc. Metodele de preparare a materialelor 2D [86] au ca rezultat nanostraturi cu dimensiuni laterale cuprinse intre 100 nm si 100 μm si grosimi cuprinse intre 1-10 monostraturi. Ele pot fi utilizate intr-o gama larga de aplicatii de la electrozi de baterii [87], la straturi de bariera [88], sau fotodetectori [89]. Tehnica de exfoliere in faza lichida (LPE) este mai versatila decat majoritatea celorlalte metode, fiind aplicata pe o gama larga de materiale stratificate. Aceast metoda implica producerea unor nanostraturi formate dintr-un numar mic de monostraturi prin ultrasonarea cristalelor stratificate in anumite lichide (solventi adecvati [90] amestecati cu surfactanti [91]). Aceasta metoda are avantajul ca este simpla, scalabila si ieftina. Dispersiile rezultate pot fi foarte usor prelucrate in materiale nanostructurate printr-o serie de metode, cum ar fi spray deposition [92], sau inkjet printing [93]. Cu toate ca este o tehnica simpla, multi parametri trebuie atent controlati, facand reproductibilitatea o sarcina dificila, rezultatul depinzand de subtilitatile din proces. Media distributiei marimilor nanostraturilor variaza de la material la material, de aceea este necesara optimizarea procesului de obtinere a dimensiunilor laterale si grosimilor dorite.

O clasa noua si distincta de fenomene in sistemele bipartite deriva din existenta zerourilor conductantei electronice la energia de zero (regimul half-filling) [94-98]. Aceste proprietati se pot manifesta in doturi cuantice ale grafenei sau in hidrocarburi alternante, ambele tipuri de sisteme fiind bipartite [97,99]. In functie de modul de legatura al firelor de transport la cele doua subretele ale sistemului bipartit se cunosc doua tipuri de zerouri. Atunci cand punctele de contact apartin aceleiasi subretele avem zerouri "usoare", iar atunci cand apartin celor doua subretele diferite A si B avem zerouri "grele". Cele doua tipuri de zerouri ale conductantei au caracteristici diferite si se comporta diferit in anumite situatii, cum ar fi modificari ale retelei sau ca urmare a efectelor de interactie.

O noua clasa de stari de margine sunt acelea fara chiralitate care exista in materiale din clasa grafenei. Exemplificam starile de margine zig-zag din grafena sau fosforena [99,100,101]. Spre deosebire de starile de margine chirale din materialele topologice, acestea nu sunt robuste la dezordine, neavand proprietatea de absenta a imprastierii inapoi (backscattering). O proprietate remarcabila insa a acestora este efectul de delocalizare datorita amestecului cu starile de bulk vecine energetic, amestec datorat prezentei impuritatilor sau dezordinilor. Implicatiile acestui efect constau in cresterea conductantei electrice la aplicarea unui potential de dezordine [102,103]. In cazul unei retele hexagonale, la variatia elementelor de hopping pe directia armchair (perpendiculara pe directia zig-zag), este de asteptat ca numarul de stari de margine sa varieze. Modificarea elementelor de hopping se poate datora stresului mecanic. Sistemul astfel descris poate fi un sistem pilot pentru a studia modul in care starile de margine se formeaza si prin care se poate varia densitatea acestora.

Pe plan international, exista un interes considerabil pentru studierea heterostructurilor bazate pe perovskiti organici si inorganici. In principal este urmarita optimizarea interfetelor si modelarea polarizarii feroelectrice in filme subtiri [104]. Dincolo de structurile cunoscute ale perovskitilor calculele numerice permit investigarea stabilitatii unor geometrii alternative sau chiar a unor materiale noi. Acest tip de investigatii este numit si design de materiale (Materials Design) si a luat un avant considerabil in

ultimii ani odata cu dezvoltarea algo- ritmilor de calcul. O metoda de cautare este folosind calcule high-throughput prin care se filtreaza elementele ce pot crea materiale noi stabile cu structura perovskitica. Astfel au fost gasite doua materiale dublu perovskitice halide fara continut de plumb, ceea ce este o realizare importanta pentru perspectiva reducerii poluarii [105-107]. Aceasta metoda reprezinta o strategie foarte eficienta pentru obtinerea de materiale noi la costuri foarte reduse prin eliminarea rapida a combinatiilor de materiale incompatibile. Pe langa cautarea de materiale noi, celulele solare bazate pe perovskiti halizi sunt intens studiate datorita usurintei cu care pot fi fabricate cat si a eficientelor crescute ce pot fi obtinute. Astfel sunt studiate marimi precum potentialul de ionizare in solidele nonmetalice, dinamica ultrarapida a purtatorilor si transportul lor eficient in filme subtiri [108]. Optimizarea eficientei celulelor solare bazate pe perovskiti halizi presupune optimizarea inaltimii barierelor de potential la interfetele heterostructurilor pentru a asigura transportul eficient de sarcina generata [109-112]. Investigatii numerice au fost folosite si pentru a stabili calitatea interfetelor ce apar in heterostructurile pentru celule solare [110]. A fost obtinuta o metodologie noua de analiza a calitatii interfetelor pe baza unui indice care ia in considerare afinitatea electronica, potentialul de ionizare, parametrii de retea si structura cristalina.

Prin folosirea unui strat multiferoic in locul celui feroelectric, functionalitatea jonctiunilor tunel feroelectrice poate fi extinsa catre patru stari distince de memorie. O jonctiune tunel multiferoica poate fi formata atat prin folosirea unui strat multiferoic activ in secventa metal(semiconductor)//multiferoic//semiconductor(metal), cat si prin cuplarea ordinii feroice in regiunea de contact in anumite tipuri de contacte metal/feroelectric [113]. In acest tip de heterostructura, cum ar fi $\text{La}_x\text{Sr}_{1-x}\text{MnO}_3/\text{BaTiO}_3/\text{La}_x\text{Ca}_{1-x}\text{MnO}_3$, a fost raportat efectul de magnetorezistenta gigant in prezenta unui mecanism de cuplaj magnetoelectric [114,115] la interfata ce genereaza, prin acumularea sau saracirea in purtatori, tranzitia intre faza metalica si izolatoare in LCMO propagandu-se doar 2-3 celule unitate [116,117]. Pe de alta parte, complexitatea problemei asociata cuplajului simulan dintre gradele de libertate de vibratie a retelei, orbital, de spin si de sarcina in heterostructurile bazate pe oxizii metalelor de tranzitie, reclama intelegerea riguroasa a modului cum poate fi stabilita si controlata contributia decisiva la electronica interfetei.

Luand in considerare cazul mai popular al compusilor metalelor tranzitionale, materialele multiferoice sunt: a) monofazate, presupunand coexistenta simultana a ordinii dipolilor electrici si magnetici [118]; aceste materiale care nu garanteaza cuplarea puternica intre cei doi parametri de ordine si sunt stabile numai la temperatura foarte joase. b) compuse, presupunand corelarea proprietatilor magnetice si electrice in mod indirect prin efecte piezoelectrice (sau electrostrictive) si magnetostictive (sau piezomagnetice) [119,120]; aceste materiale prezinta o polarizabilitate si magnetizare scazute.

O atentie sporita este orientata de asemenea spre materialele organice. Varietatea tipurilor de legaturi si versatilitatea structurilor din sistemele organice deschid posibilitatea de a fi modificate usor prin actiunea stimulilor magnetici si/sau electrici. Astfel, sarurile organice bazate pe transfer de sarcina electrica [121] si compusii metalo-organici [122] au demonstrat un comportament multiferoic. In ciuda acestor realizari, se cauta in continuare materiale cu o cuplare magnetoelectrica fiabila la temperatura camerei.

Imbunatatirea constanta a tehnicilor experimentale AFM si STM a reprezentat o preocupare constanta a ultimilor ani. Intr-un experiment recent remarcabil, Wagner et al. [123] au aratat ca prin atasarea unui dot cuantic (QD) de varful unui cantilever AFM se obtine o rezolutie imbunatatita, cu caracteristici 3D, permitand de asemenea un acces separat la hartile topologice si de potential. Ingredientele cheie ale acestei tehnici (denumita de autori microscopie de baleiaj cu dot-uri cuantice) sunt: i) regimul rezonant al QD si ii) variatia suplimentara de frecventa a cantilever-ului datorata proceselor de tunelare inspre (si dinspre) QD. Descrieri teoretice recente, care tin cont de efectele interactiei electron-electron, exista doar pentru situatia (diferita) in care dotul cuantic este plasat pe substrat [124], fiind sistemul de masurat, iar nu parte a sistemului de masura, ca in cazul SQDM.

O alta categorie de experimente STM de ultima generatie au reusit tunelarea catre un atom individual caruia i s-a pus in evidenta anizotropia magnetica [125,126]. Spectroscopia STM aplicata pe nanostructuri de grafena reprezinta deasemenea o preocupare experimentală de actualitate [127], cum este si investigarea prin aceasta metoda a suprafetelor de izolatori topologici [128]. Recent D. Toroz et al. [129] au sugerat ca in cazul in care exista o acumulare de sarcina (electroni sau goluri) pe nanostructura de masurat, corelatiile electronice pot juca un rol important si semnalul STM devine in acest caz proportional cu suprapunerea spatiala dintre functii de unda cu numar diferit de particule in punctul unde se face masuratoarea. "Maparea" spatiala a acestei probabilitati de tunelare a fost numita functie de unda

quasi-particula (QPWF), care este identica cu una din functiile proprii ale nano-structurii de masurat in absenta interactiilor, dar poate diferi semnificativ in prezenta coreratiilor electron-electron. Din punct de vedere teoretic, calculele de curent intre tip-ul de STM si proba se fac de regula folosind metoda regulii de aur Fermi (FGR).

Magnetii uni-moleculari (single-molecule magnet - SMM) sunt sisteme care se comporta ca un nanomagnet individual [130] si al caror spin localizat poate fi o componenta de baza pentru nano-dispozitivele organice [131,132]. La fel ca in fizica doturilor cuantice si in cazul SMM masuratorile de transport in stare stationara evidentiaza efecte ca blocada Coulombiana, tunelare secventiala sau conductanta diferentiala negativa [133,134]. Ganzhorn et al. [135] au masurat si proprietatile de transport ale unui nanotub de carbon in vibratie pe care este asezat un nanomagnet molecular. Acest rezultat reprezinta prima demonstratie experimentală a detectiei unui spin molecular prin intermediul modurilor de vibratie. Bruggemann et al. au abordat teoretic problema transportului printr-un magnet unimolecular in prezenta modurilor vibronice [136,137] considerand doar o interactie de schimb izotropa intre spinul electronic si spinul molecular. Rezultatele experimentale inregistreaza insa anizotropii magnetice puternice a caror neglijare in calculele teoretice nu poate fi justificata. De asemenea, termenii de schimb non-Ising sunt esentiali in operatiile de inversare a spinului molecular [138]. O alta aplicatie recenta a couplajului cu modurile de vibratie in detectarea incarcarii unei molecule prin masuratori AFM/STM a fost raportata experimental de Kocic et al. [139].

In cadrul opticii cuantice atomice cel mai cunoscut efect al naturii cuantice a radiatiei este efectul Purcell: modificarea drastica a proceselor de recombinare radiativa in functie de mediul in care acestea au loc. Pentru ansambluri de doturi cuantice plasate in microcavitati echivalentul efectului Purcell a fost observat inca din 1998 [140]. Ulterior a devenit clar ca proprietatile electronice si optice ale doturilor cuantice pot fi folosite ca elemente constitutive ale nanodispozitivelor pentru aplicatii in tehnologia informatiei [141], optoelectronica (laseri pe baza de doturi cuantice [142]), nanostructuri fotonice [143] si a prelucrării imaginii (a se vedea recent lansatul ecran QLED de catre Samsung). Alte efecte observate sunt fluorescenta de rezonanta in doturi cuantice [144], formarea dubletilor Autler-Townes [145] si a tripletelor Mollow [146]. Modelarea teoretica a acestor efecte este inca intr-un stadiu incipient dar este de asteptat ca ritmul accelerat in care se propun noi experimente sa reclame noi dezvoltari teoretice.

O alta clasa de aplicatii bazata pe proprietatile optice la scara nanometrica o reprezinta sursele de energie. Incepand cu anul 2011, compozite bazate pe politrifetilamina si nanotuburi de carbon cu mai multi pereti sunt folosite ca materiale active in catozii bateriilor cu ioni de litiu. Primele studii privind oxidarea electrochimica a trifetilaminei au fost raportata in urma cu 17 ani cand produsul de reactie era raportat a corespunde politrifetilaminei [147]. O intrebare fara raspuns este daca performantele materialului compozit politrifetilamina si nanotuburi de carbon in aplicatii precum cel al bateriilor cu Li [148] sau al celulelor solare [149] sunt dependente de ponderea masica a tuburilor cu pereti metalici si respectiv semiconductori. In scopul de a oferi un raspuns astfel de aplicatii ar trebui efectuate folosind nanotuburi de carbon cu un singur perete inalt separate in tuburi metalice (M-SWNTs) si semiconductoare (S-SWNTs), pentru care o detaliata cunoastere a proprietatilor optice si electrochimice este necesara intr-o prima etapa. Mentionam ca dupa inspectarea literaturii si in conformitate cu baza de date Web of Science putem afirma urmatoarele: i) in prezent nu este raportata nici o lucrare pe compozite bazate pe politrifetilamina si M-SWNTs / S-SWNTs; ii) studiile raportate pana in prezent au indicat ca influenta M-SWNTs / S-SWNTs in diferite matrici polimerice poate fi diferite functie de caile de dezexcitare posibile conform diagramei nivelelor de energie ale constituentilor materialului compozit [150, 151] si iii) influenta M-SWNTs si S-SWNTs asupra fotoluminescentei anizotrope a diferitelor polimeri conjugati nu a fost studiata pana in prezent.

In ultimul timp exista o crestere considerabila a interesului fata de aplicatiile in care nanofluorurile dopate cu pamanturi rare (Er, Ho, Tm) etc.) ce prezinta fenomenul de up-conversie (conversia radiatiei infrarosii in domeniul vizibil) deschid noi alternative in ceea ce priveste markerii fluorescenti pentru bioimagistica si biodetectie atat in vitro cat si in vivo [152] sau ca agenti antimicrobieni [153]. Comparativ cu markerii cu coloranti aceste materiale prezinta mai multe avantaje, printre care stabilitatea chimica superioara, toxicitatea mai scazuta, si un raport semnal/zgomot bun. Nanoparticulele magnetice sunt deasemenea nanomateriale cu dimensiuni controlate ce pot fi manipulate din exterior si care cresc contrastul imagisticii de rezonanta magnetica nucleara. Cele mai multe dintre abordarile actuale se bazeaza pe diferitele moduri de combinare (legare chimica) ale nanoparticulelor ce prezinta up-conversion cu cele magnetice sau sub forma de structuri core-shell [152] iar printre cei mai folositi pentru aceasta sunt

compusii în a caror structură intra Gd^{3+} (ca de ex. GdF_3 [2], $NaGdF_4$ [154]) sau în care acesta intra ca dopant [155,156]. S-a observat că în cazul dopării cu Gd^{3+} pe lângă faptul că nanocristalele devin super-paramagnetice magnetice, fenomenul de up-conversion crește de câteva ori [157]. Acest ultim studiu arată o interrelatare strânsă între fenomenele de natură magnetică (super-paramagnetism) și cele de natură optică (up-conversion) cu efect benefic dar încă insuficient studiat. În plus, sintezele acestor compusi sunt mai simple și mai controlabile.

Tema 2

Proiectarea de materiale cu proprietăți bine definite prin intermediul studiului structurii electronice pe baza Teoriei Funcționalei de Densitate sau prin simulări micromagnetice reprezintă o procedură bine definită la nivel mondial, având și o aplicabilitate extinsă. Materialele Heusler, datorită caracteristicilor semimetalice la nivelul Fermi, prezintă un mare potențial de aplicabilitate în domenii precum cel al supraconductoarelor, al termoelectricității sau al spintronicii și de aceea sunt intens studiate la nivel internațional, inclusiv prin metode ab-initio bazate pe Teoria Funcționalei de Densitate. Similar, în ultimele două decenii, semiconductorii care conțin elemente din grupele II-IV principale, au trezit un interes științific deosebit datorită prezentei la nivelul Fermi a unei benzi interzise largi. Această caracteristică determină proprietăți optice convenabile pentru aplicații în optoelectronică precum dispozitive cu emisie luminoasă în regiunea de lungime de undă scurtă a spectrului vizibil. Prin doparea cu elemente tranzitoriale magnetice se pot investiga, atât teoretic cât și experimental [T10-S12], aspecte induse de magnetismul diluat specific, în vederea căutării unor noi modalități de control magneto-optic. În sfârșit, în privința compusilor supraconductori non-centrosimetrici, pot fi menționate cercetări foarte recente în acest domeniu, legate în special de posibilele aplicații ale sistemelor implicate. Recent a fost raportată realizarea unui dispozitiv cu efect de tunelare, de tip FET, ale cărui proprietăți supraconductoare și de cuplaj spin-orbita Rashba pot fi modificate prin aplicarea unui câmp electric [T13] iar efectul modelului de structură de domenii ferroelectrice asupra modulației spațiale a proprietăților supraconductoare și controlul temperaturii critice în supraconductori oxidici prin manipularea polarizării ferroelectrice în straturi $BiFeO_3/YBa_2Cu_3O_{7-x}$, a fost publicat în referință [T14], în ambele cazuri, cunoașterea structurii electronice în sistemul supraconductor și răspunsul acesteia la factorii perturbatori devenind de importanță crucială. Studii complexe privind legătura dintre caracteristicile morfo-structurale ale sistemelor de nanoparticule cu distribuții de dimensiune și forma și proprietățile magnetice ale acestora nu au fost raportate până în prezent, în ciuda faptului că la nivel mondial se pune deja problema unei imagistici 3D cu rezoluție atomică [T15], impedimentul fiind legat în special de modalitatea teoretică de luare în considerare a distribuțiilor de formă și dimensiune. Pe de altă parte, însuși modelul de axiotaxie vizând orientarea preferențială a planelor de difracție la interfața metal/semiconductor epitaxial [T16] este un model controversat pe plan internațional, iar verificarea lui pe baza metodologiei bazate pe difracția de raze X de înaltă rezoluție va reprezenta o premieră mondială. metodologia de determinare

Sinteza și caracterizarea de noi nanosisteme cu dimensionalitate redusă, prin care să poată fi ajustate proprietățile nanostructurilor atât în raport cu dimensiunea cât și cu dimensionalitatea acestora, reprezintă un domeniu de vârf al cercetărilor de fizică a materialelor chiar și la nivel internațional. Data fiind multitudinea acestor cercetări, avansul poate fi dat numai prin găsirea unor condiții de procesare neconvenționale, care să conducă la proprietăți neașteptate, legate în special de parametrii extrinseci ai nanostructurilor obținute (de exemplu morfologia).

În ultimii ani, suprafețele materialelor ferroelectrice au început să fie studiate din ce în ce mai intens în vederea exploatării proprietăților lor catalitice și fotocatalitice [D38-D40]. Compensarea câmpului de depolarizare într-un strat subțire ferroelectric cu polarizarea orientată perpendicular pe strat se poate produce prin acumularea de purtători de sarcină în nanostructuri metalice (nanoparticule, straturi subțiri) depuse pe aceste straturi. Aceste nanoparticule încărcate vor avea, în mod evident, o activitate chimică destul de importantă [D41]. De asemenea, s-a remarcat o activitate catalitică remarcabilă atunci când suprafețele ferroelectrice sunt cuplate cu nanoparticule din metale nobile (efect sinergic) [D42], aceasta modalitate de procesare a sistemelor de NP metalice (sisteme 0D) pe suprafețe ferroelectrice deschizând un nou orizont privind controlul chimismului sistemelor 0D prin intermediul polarizării suportului pe care sunt depuse.

În afara de nanofluidele pe baza de nanoparticule de magnetită care sunt investigate în mod aprofundat în literatura de specialitate, în special în raport cu diversele aplicații bio-medicale, în ultimii s-a acordat

din ce în ce mai multă atenție nanofluidelor pe baza de nanoparticule de ferite cu constanta de anizotropie magnetică superioare magnetitei [D43]. De asemenea s-au preparat și investigat nanofluide pe baza de nanoparticule de magnetita cu forma cubică sau octaedrală care prezintă valori SAR superioare celor obținute pentru nanoparticulele sferice de magnetita [D44]. De asemenea sunt cautate în mod curent soluții de îmbunătățire a proprietăților magnetice ale nanoparticulelor prin formarea de structuri tip core-shell implicând diferite tipuri de cuplaje de interfață (fie de tip exchange-spring sau exchange-bias). În acest context, un interes deosebit a fost arătat în ultimul timp structurilor de tip core-shell (nu neapărat 0D) implicând cuplaje multiferoice, fiind raportate astfel nanostructuri core-shell din materiale piezoelectrice și magnetice, ca de ex.: $\text{CoFe}_2\text{O}_4/\text{BaTiO}_3$ [D45,D46], $\text{Pb}(\text{Zr}_{0.52}\text{Ti}_{0.48})\text{O}_3/\text{NiFe}_2\text{O}_4$ [D47], $\text{NiFe}_2\text{O}_4/\text{BaTiO}_3$ [D48].

Oxizii diluați magnetic (DMO), dopați cu ioni ai metalelor de tranziție au captat o atenție deosebită pe plan internațional, atât datorită proprietăților specifice ce le conferă un potențial aplicativ urias, cât și al fenomenelor fundamentale răspunzătoare de magnetismul neuzual specific acestora. Datorită piezoelectricității, piroelectricității [D49-D51], proprietăților catalitice, fotochimice [D52], și magnetice [D53], unul dintre materialele intens cercetate și utilizate în aplicații este oxidul de zinc (ZnO). Cercetări științifice au arătat că dopajul ZnO cu ioni de pământuri rare îmbunătățește absorbția luminii datorită creșterii nivelurilor de energie a impurităților în intervalul benzii [D53-D55]. Doparea cu ioni de pământ rar (Sm^{3+} , Ce^{3+} , Gd^{3+}) produce capcane pentru purtători de sarcină fotogenerați, reducând astfel rata de recombinare a perechilor de electroni, ceea ce duce la o creștere a eficienței fotocatalitice în ZnO . Nanoparticulele ZnO dopate cu Nd au prezentat proprietăți fotoluminescente, feromagnetice și fotocatalitice îmbunătățite comparativ cu nanoparticulele ZnO nedopate [D56]. ZnO dopat cu Fe a arătat o mare capacitate pentru degradarea și eliminarea poluanților de mediu [D57]. De asemenea există numeroase studii referitoare la proprietățile fotocatalitice deosebite ale TiO_2 [D58-D61].

Referitor la sistemele 2D tip filme subțiri și multistraturi, interesul actual asupra sistemelor din clasa celor supuse atenției în cadrul acestui proiect este intens.

Oxidul de hafniu este un material standard pentru industria dispozitivelor electronice (în special tranzistori cu efect de câmp de tip MOSFET), fiind utilizat ca oxid de poartă. Recent, s-a descoperit că filmele de HfO_2 crescute prin Depunere de Straturi Atomice (ALD) pot prezenta proprietăți feroelectrice [D62-D64], putând fi îndreptate astfel către alte aplicații de tipul memoriilor nevolatile.

Pentru cercetarea și dezvoltarea de noi demonstratori de dispozitive optoelectronice (ex. celule fotovoltaice [D65,D66], diode emițătoare de lumină [D67], tranzistori transparenti) este necesar cel puțin un electrod transparent, care de obicei este un semiconductor degenerat (ex. ITO - $\text{Sn}:\text{In}_2\text{O}_3$, AZO - $\text{Al}:\text{ZnO}$, FTO - $\text{F}:\text{SnO}_2$) depus pe arie mare și în acest sens se depun eforturi pentru dezvoltarea de tehnologii adecvate inclusiv la nivel internațional.

Materialele feroelectrice sunt recunoscute ca materiale ce au permis dezvoltarea unui număr mare de dispozitive precum filtre și senzori, dispozitive de unde acustice de suprafață (SAW), memorii nevolatile, dispozitive optice sau celule fotovoltaice. Pentru îmbunătățirea performanțelor acestor dispozitive există un spectru larg de relații și dependențe privind relația proces-microstructură și microstructură-proprietăți intens studiat pe plan mondial [D68-D70]. În cazul arhitecturilor mai complexe (tipice dispozitivelor), fenomenele de interfață sunt definitorii. Din acest punct de vedere studiul proprietăților feroelectrice la scară nanometrică devine important mai ales dacă luăm în considerare proprietățile anizotrope ale acestor materiale. Astfel, creșterea de straturi subțiri feroelectrice puternic texturate, cu diferite orientări cristaline, poate avea un rol important la îmbunătățirea proprietăților dispozitivelor bazate pe straturile subțiri feroelectrice, iar studiile propuse în proiect se încadrează în trenul mondial vizând aceste tipuri de sisteme.

Datorită lungimii de coerență foarte mici în cazul materialelor supraconductoare cu temperatura critică ridicată, păstrarea unor valori rezonabile ale curenților critici în câmpuri magnetice de interes practic este condiționată de existența unor defecte de dimensiuni nanometrice, comparabile cu lungimea de coerență. Aceste defecte au rolul de a fixa liniile de câmp magnetic, fiind deci centri de pinning. În continuare se depun eforturi în nanotehnologia centrilor pinning în sisteme supraconductoare 2D, în Europa, SUA, Japonia și, mai recent, China.

Feromagnetismul și supraconductivitatea au fost în mod tradițional considerate incompatibile. În ultimul deceniu aceasta imagine s-a modificat datorită atât progreselor majore înregistrate la nivel mondial în înțelegerea teoretică dar și a experimentelor care au dovedit coexistența supraconductivității cu feromagnetismul. Mai mult de atât, s-a propus teoretic [D71] și s-au efectuat și câteva experimente

concludente [D72,D73] cu privire la eficienta nano-incluziunilor magnetice ca centri pinning. Concluzia a fost ca centrii de pinning magnetici ar putea fi mai puternici decat cei non-magnetici datorita interactiei lor nu doar cu miezul normal al vortexului, extins pe dimensiunea lungimii de coerenta, ci si cu supra-curentul circular al vortexului, extins pe o lungime mult mai mare, numita adancime de patrundere London. Altfel spus, un centru de pinning magnetic contribuie la fixarea mai multor vortexuri. Din alta perspectiva, perechile Cooper create in supraconductor prin condensarea Bose-Einstein pot patrunde in feromagnet prin efectul de proximitate, conducand la o varietate de configuratii coerente de spin si sarcina, importante atat din punct de vedere fundamental si aplicativ. Daca luam in considerare si interfata, cat si posibilitatea de a fabrica supraretele nanometrice, efectele bidimensionale si topologice pot duce la o multitudine de noi fenomene, intens studiate in acest moment la nivel international.

Sinteza si caracterizarea de materiale nanocompozite diverse pentru aplicatii high-tech cuprinde, printre altele, domeniul materialelor autoreparabile, recent introdus pe plan mondial ca domeniu de cercetare in stiinta materialelor. Cu toate acestea, potentialul aplicativ al acestor materiale este enorm, fiind studiate intens materiale autoreparabile sub forma de polimeri si elastomeri (sisteme intrinseci si extrinseci), sisteme compozite pe baza de polimeri si fibre, acoperiri anticorozive autoreparabile, cimenturi autoreparabile, ceramici autoreparabile (ceramici pe baza de faze MAX) si chiar metale autoreparabile (e.g. prin precipitate de Au). Interesul pentru materialele termoelectrice nano-compozite pe baza de skutteruditi dopati a crescut la nivel international. Pe langa posibilitatea de imbunatatire a performantelor termoelectrice, aceste materiale pot avea de asemenea si o rezistenta mecanica sporita, fapt care le face mult mai atractive pentru aplicatii. Dintre tipurile de nanoparticule investigate in acest scop amintim: oxizi nemetalici /metalici, boruri metalice [N61, N62] sau nanotuburi de carbon [N63]. Eforturile depuse in ultimele doua decenii pentru gasirea de noi materiale stocatoare de hidrogen viabile (cu continut ridicat de hidrogen si absorbtie-desorbtie reversibila de hidrogen la temperaturi in jur de 100 °C) a fost urias. In ultimii ani au fost produse si studiate din punct de vedere a proprietatilor stocatoare de hidrogen noi hidruri complexe de tip borohidruri mixte si amidoborani [N64] cu un continut foarte ridicat de hidrogen. Prin nanoconfinarea alanatului de sodiu in aerogeluri de carbon si catalizarea cu nanoparticule de $TiCl_3$ [N65] sau prin utilizarea catalizatorilor pe baza de Ni si ferita de cobalt [N66] pentru stimularea desorbtiei de hidrogen de catre amoniaboran s-a scazut temperatura de desorbtie a hidrogenului si s-a imbunatatit cinetica absorbtiei/ desorbtiei de hidrogen. In privinta materialelor pentru descompunerea apei pe plan international sunt intens studii fotoanodice de hematita, urmarindu-se nanostructurarea si doparea lor precum si combinarea lor cu catalizatori cunoscuti pentru descompunerea electrochimica a apei. In ceea ce priveste interesul crescut la nivel international pentru studiul proprietatilor cristalelor ionice si al compozitelor lichide ionice-nanoparticule acesta se datoreaza potentialului lor aplicativ in domeniul celulelor solare, materialelor pentru baterii, senzori electrochimici, comutatori electroluminescenti, in ultimii ani fiind publicate mai multe recenzii cu privire la acest subiect. [N20, N21]. Mai mult, aceste materiale pot prezenta proprietati interesante de surfactant si de cristal lichid [N25], cu posibilitate de utilizare in multe aplicatii, de la cataliza [N67] la aplicatii biologice [N68] sau biochimie [N69]. In domeniul materialelor magnetice, pe plan mondial, eforturile globale sunt indreptate spre strategii de dezvoltare de noi clase de materiale magnetice care pot suplini cu succes actualele materiale magnetice bazate pe pamanturi rare (in speta Nd si Sm) [N70-N72], in contextul geopolitic global in care resursele minerale de pamanturi rare sunt concentrate aproape in exclusivitate intr-o singura regiune a lumii care detine un monopol strategic. In acest sens, eforturile sunt indreptate atat asupra gasirii de noi materiale (din sistemele Fe-N, Fe-Pt, Co-Cr, Co-Pt, etc.) cat si asupra realizarii de materiale inovative, nanocompozite, multifazice, cu interactii magnetice imbunatatite prin rafinare microstructurala. In acest sens, in cadrul unei strategii integrate pentru materiale critice [N73] Departamentul de Stat al SUA a demarat proiecte multianuale de zeci de milioane de dolari pentru realizarea de materiale magnetice nanocompozite [N74] de tip hard-soft.

Tema 3

Studiile recente au aratat ca utilizarea hidroxiapatitei (HAp) drept sistem de eliberare controlata a agentilor antimicrobieni poate reprezenta o modalitate eficienta de prevenire si de tratare a infectiilor microbiene asociate tesutului cutanat [72-74]. Tratamentul uzual, al infectiilor microbiene asociate plagilor cutanate, consta in administrarea locala si sistemica de antibiotice in doze mari, pe o lunga perioada de timp. Ca urmare a unui numar tot mai mare de boli infectioase cauzate de catre diferite bacterii patogene si dezvoltarea rezistentei la antibiotice, companiile farmaceutice si cercetatorii sunt in cautare de noi agenti

antibacterieni si metode inovatoare pentru tratarea infectiilor [75-77]. In practica clinica tratarea infectiilor este dificila si costisitoare. Tratamentele clinice disponibile la momentul actual pentru tratarea ranilor infectate sunt terapia sistemica [78] si antibioticele locale [79]. Toxicitatea agentilor sistematici si dificultatile in realizarea concentratiilor potrivite in locul infectat sunt dezavantajele terapiei sistemice [80]. In cazul antibioticelor, acestea sunt eliberate lent pe o perioada prelungita, determina o cresterea a rezistentei la tulpinile microbiene [81]. In momentul de fata, materialele la scara nanometrica au devenit noi agenti antimicrobieni, acest lucru datorându-se valorii ridicate a raportului suprafata specifica/volum si proprietatilor lor chimice si fizice. Studiile au evidentiat faptul ca argintul si compusii pe baza de argint au un puternic efect antimicrobian prin virtutea proprietatilor lor antiseptice, fata de mai mult de 16 tipuri de bacterii, inclusiv *Escherichia coli* si *Staphylococcus aureus*, ambele prezente in infectii nosocomiale. Studii privind efectele antimicrobiene ale pulberilor de HAp dopate cu argint au aratat ca acestea pot avea un efect bactericid si/sau fungicid atat in medii bogate in substante nutritive, cat si in medii sarace in substante nutritive [82]. Materialele pe baza de argint cu proprietati antimicrobienele au captat atentia datorita toxicitatii scazute a ionilor activi de Ag asupra celulelor umane, precum si datorita faptului ca acestea sunt un biocid de lunga durata cu stabilitate termica si volatilitate scazuta [83, 84]. Pe de alta parte, in ultimii 30 de ani, dezvoltarea si utilizarea agentilor antimicrobieni in tratarea leziunilor cutanate acute sau cronice, s-a dezvoltat de la stadiul de cercetare clinica la aparitia câtorva produse comerciale de serie.

In acest context, unul din rezultatele majore ale acestui studiu va fi realizarea unei noi metode de obtinere a unei suspensii stabile de hidroxiapatitei dopate cu argint, prin ajustarea parametrilor de sinteza, pentru o mai buna intelegere a fenomenului implicat in formarea unor agenti antimicrobieni cu biocompatibilitate optima. Un alt obiectiv important il reprezinta studiile coloidale ale suspensiilor stabile de hidroxiapatita dopate cu concentratii diferite argint (AgHAp). Masuratorile de ultrasunete pe suspensii de AgHAp reprezinta o noutate atat la nivel national cat si la nivel mondial. Mai mult, studiile de citotoxicitate ce vor fi efectuate pe celule procariote (*Staphylococcus aureus* si *Escherichia coli*) vor aduce noi informatii privind oportunitatea utilizarii suspensiilor de AgHAp in tratamentul plagilor infectate, care reprezinta una dintre cele mai mari probleme in medicina ca urmare a riscului foarte mare de infectii postoperatorii.

In prezent, gradul de dezvoltarea al medicinei moderne si al bioingineriei a creat oportunitatea de a obtine materiale noi si imbunatatite, care ar putea contribui considerabil la imbunatarirea calitatii vietii. La ora actuala una dintre cele mai grave probleme intalnite in domeniul medical este dezvoltarea de complicatii ale interventiilor chirurgicale datorate infectiilor asociate implanturilor [85]. Aceste infectii aparca urmare a bacteriilor care adera la implant si colonizeaza fie suprafata implantului, fie tesutul ce inconjoara suprafata implantului [86-87]. Aceste tipuri de infectii sunt cunoscute sub numele de infectii implantabile si sunt tratate, de obicei, cu antibiotice foarte puternice [88]. Cu toate acestea, in ultimele decenii, s-a raportat aparitia a tot mai multor tulpini microbiene rezistente la tratamentele conventionale cu antibiotice [88, 89]. Conform studiilor recente [90-93], numarul de interventii chirurgicale necesare din cauza relaxarii mecanice a inlocuirii totale a soldului creste anual [92,93]. In acest context, cercetatorii si medicii au ajuns la concluzia ca o metoda de imbunatatire a implanturilor ar fi sa le acopere cu un biomaterial imbunatatit cu diferiti agenti antimicrobieni [94, 95] capabili sa promoveze cresterea osoasa pe suprafata implantata [96]. In plus, o solutie pentru a conferi proprietati antimicrobiene pulberilor de HAp ar fi integrarea in structura a oligoelementelor, cum ar fi Zn, Ag, Au, Cu, Ti sau Cu [98,99]. Unul dintre cele mai raspândite oligoelemente implicate in diferite functii ale corpului uman este zincul care influenteaza pâna la 200 de enzime [96]. Pe lânga rolul zincului in mentinerea structurii membranei, sinteza proteinelor si proliferarea celulelor, s-a dovedit ca zincul este de asemenea eficient in inhibarea cresterii tulpinii microbiene *C. albicans* [98]. In acest context, hidroxiapatita dopata cu zinc ar putea fi o solutie pentru obtinerea unui biomaterial imbunatatit care sa poata fi utilizat pentru acoperiri ale implanturilor [99, 100]. In ultimele doua decenii au fost efectuate numeroase cercetari pentru a dezvolta biomateriale pentru acoperiri cu proprietati antimicrobiene, dar suntem inca probabil la inceputul calatoriei. De fapt, in ciuda progreselor extrem de reusite ale studiilor preclinice, exista inca o discrepanta remarcabila intre strategiile propuse si aplicatiile lor clinice [101, 102]. Pentru a fi utilizate in implanturi straturile acoperitoare realizate trebuie sa treaca mai multe teste ca urmare a problemelor de citotoxicitate, imunoreactivitate sau genotoxicitate ce trebuie a fi pe deplin cunoscute si intelese. Ca urmare, testele *in vitro* si *in vivo* pot conduce atat la o mai buna intelegere a mecanismelor privind interactiunea dintre aceste materiale coperitoare nou create si mediul biologic cat si la dezvoltarea

domeniului biomedical și a aplicațiilor clinice în care acest tip de materiale ar putea fi utilizate. Este necesară o clasificare amănunțită și un limbaj comun pentru a standardiza testele adecvate și cerințele de reglementare realiste, pentru a favoriza trecerea de la studiile preclinice la protecția eficientă a pacientului. La nivel național, aspectul clinic nu a fost abordat, iar cercetarea efectuată în cadrul acestui proiect va sprijini creșterea competitivității autohtone în producția de biomateriale.

Recent au fost raportate studii care au confirmat biocompatibilitatea și bioactivitatea în contact cu diferite tipuri de celule a splaturilor policristaline și a filmelor subțiri pe baza de Fe-Pd [103].

Soluția comercială de funcționalizare a implanturilor metalice este reprezentată de acoperirea cu straturi groase bioactive de HA sau amestecuri de HA și beta-fosfat tricalcic [β -Ca₃(PO₄)₂] prin metoda depunerii combustive în plasmă [12]. Această tehnologie este costisitoare, iar acoperirile implantologice groase produse sunt susceptibile la delaminare, și în plus, din cauza temperaturii mari de proces sunt induse disocieri fazice, care conduc la un comportament biologic imprevizibil. Pe parcursul ultimilor ani au fost propuse o serie de metode de depunere alternative, chimice și fizice, dintre care cea mai promițătoare rămâne pulverizarea în câmp magnetron în regim de radio-frecvență, metodă care este recunoscută pentru aderență excelentă a filmelor dense și uniforme depuse, care, în plus, este și ușor de scalat la nivel industrial [12, 21, 104]. Avantajele certe ale acestei tehnici de depuneri sunt atractive și pentru prepararea de filme de sticlă (material eminamente friabil) cu rol pasiv ca substrat biocompatibil și biodegradabil pentru micro-dispozitive electronice sau, cu rol activ ca dielectric pentru structuri de tip capacitor sau tranzistori cu efect de câmp. Prepararea de filme subțiri de bio-sticlă prin pulverizare în câmp magnetron în regim de radio-frecvență rămâne în continuare la nivel internațional un domeniu puțin explorat [21, 24]. În cazul filmelor de hidroxiapatită, există o literatură științifică mai extinsă [12, 104], însă se desprinde o eterogenitate a datelor privind influența concentrației dopantului și modificărilor structurale induse asupra răspunsului mecanic și biologic a materialului HA sintetizat, datorită dispersiei de abordări și realizarea de studii punctuale și izolate, și nu a unor cercetări sistematice și unitare așa cum este previzionat în prezenta propunere de proiect.

Utilizarea de proteze de tip „scaffold” cu porozitate controlată din materiale bioactive, capabile de a induce regenerarea țesuturilor conjunctive dure, este privită în prezent ca o soluție de viitor în ingineria tisulară osoasă și reprezintă o direcție biomedicală în plină dezvoltare [14 - 18]. Implicit, fabricarea de proteze „scaffold” prin printare 3D suscită un interes remarcabil atât la nivel fundamental cât la nivel industrial. Fabricarea de proteze „scaffold” ceramice cu proprietăți mecanice și biologice optime [14, 17] depinde însă de calitatea materialelor sursă. Obținerea de cerneluri și/sau paste pe bază de materiale ceramice și/sau vitroase bioactive în vederea realizării de proteze „scaffold” cu porozitate controlată cu aplicații în inginerie tisulară reprezintă o provocare actuală, și deci, identificarea de soluții optime reprezintă un obiectiv declarat al INCDFM.

Pe plan mondial sunt firme de renume care produc elemente piezoceramice cum ar fi APC International (SUA), Morgan Advanced Materials (UK), Beijing Ultrasonics (China), etc. Firma Relyon Plasma (Germania) a dezvoltat o serie de tehnologii pentru generarea de plasmă rece pentru diverse aplicații. K. Ukino și A. V. Karazo de la Pennsylvania State University au contribuții importante la dezvoltarea domeniului transformatoarelor piezoelectrice. Aceste tehnologii vor avea un impact mare în viitor în domeniul sănătății prin reducerea numărului de gemeni, activarea suprafețelor și în obținerea ozonului.

Acoperirea cu proteine a nanoparticulelor (în special TiO₂) aflate în mediu biologic (sange sau mediu de cultură) a fost abordată într-un număr semnificativ de studii [105-107]. Efectul fotodinamic *in vitro* al suspensiilor de TiO₂ stabilizate cu PEG a fost observat [108] fără a fi efectuate și studii în sisteme aceluare pentru corelarea/identificarea proceselor fotocatalitice cu fotocitotoxicitatea observată. Câteva lucrări (majoritatea referitoare la filme subțiri) raportează îmbunătățirea activității fotocatalitice a TiO₂ în prezenta PEG [109-111] dar studiile realizate sunt dispartate, incomplete și nu discută implicațiile rezultatelor obținute în context fotodinamic.

Nanocristalele de BGO au fost obținute din soluții ale oxizilor de bismut și germaniu în mediu acid care, prin tratamente termice de densificare, conduc la formarea de materiale de tip sol-gel. Ulterior, prin tratamente termice la 950° C, are loc reacția în fază solidă între oxizi, fapt ce conduce la obținerea nanoparticulelor de germanat de bismut. Activarea acestor nanoparticule s-a făcut printr-o metodă asemănătoare de activare covalentă preluată din chimia peptidelor.

De curând au apărut pe piața medicală dispozitive portabile 'tip stilou' care își propun să evalueze ad-hoc mobilitatea implantului după realizarea unui contact mecanic de scurtă durată cu acesta. Este de presupus

ca asemenea dispozitive folosesc vibrații mecanice de înaltă frecvență pt. a măsura impedanța mecanică a implantului.

Pe plan internațional, există un interes crescut pentru realizarea de materiale obținute în prezenta extractelor de plante pentru că: costul este redus, abundența în natură, reziduurilor de legume care pot fi reciclate și astfel costurile de producție sunt reduse la minimum dar și pentru materialele obținute combină beneficiile plantelor cu alte componente obținându-se materiale cu proprietăți îmbunătățite și aplicabilitate extinsă.

Semiconductorii organici oferă un bun potențial pentru aplicații în optoelectronică, datorită structurii lor chimice versatile care permite reglarea energiei benzii interzise și costuri de producție reduse în comparație cu semiconductorii anorganici. O atenție deosebită a fost acordată studiului tranzistorilor cu efect de câmp biocompatibili și biodegradabili care funcționează la tensiuni mici și se bazează pe filme subțiri nucleobazice [112]. Cercetarea în clasa emergentă a electronicii "verzi" poate ajuta la îndeplinirea nu numai a promisiunii originale a electronicii organice, care este de a furniza materiale și dispozitive cu costuri reduse și eficiente din punct de vedere energetic, dar și a obține funcționalități inimaginabile pentru electronică, de exemplu integrarea benignă în viața și mediul înconjurător [6].

Tema 4

Situația actuală la nivel internațional va fi prezentată pe principalele domenii vizate din punct de vedere al potențialelor aplicații.

Energie-Mediu:

Celule solare cu semiconductori tradiționali- Studiile teoretice pentru spectrul terestru (AM 1.5 G, ASTM G173), arată că limita maximă de conversie care poate fi obținută de o celulă solară c-Si cu un strat ideal de tip DC sau UC este de 36,6% și respectiv de 37,4% [grig3, grig4], față de ~30% limita teoretică maximă pentru celulă fără straturi DC și UC.

Literatura prezintă diferite exemple de utilizare a pământurilor rare pentru a îmbunătăți eficiența celulelor solare, atât prin DC, cât și prin UC [grig5-grig8]. Efortul la nivel internațional este de a găsi compozițiile și microstructurile optime în raport cu tehnologia de fabricație pentru controlul și maximizarea proprietăților de conversie ale celulelor.

În domeniul conversiei energiei solare în energie electrică, de-a lungul timpului, s-au delimitat trei perioade succesive, în funcție de obiectivele de eficiență și cost și de abordarea științifică implicată. Astfel, în prima generație de celule solare, structura cea mai abordată a fost joncțiunea simplă *pn* semiconductoră, cu eficiență moderată (~20%) și cost ridicat datorită consumului mare de material semiconductor necesitat. A doua generație de celule solare este reprezentată de celulele cu straturi subțiri semiconductoră, cu un preț mai scăzut dar și cu eficiență, inițial mică. În decursul timpului, eficiența acestora a crescut de la câteva procente la valori aproape similare cu cele ale celulelor din prima generație. A treia generație de celule a apărut ca urmare a progreselor înregistrate în știința nanomaterialelor și a nanostructurilor semiconductoră. Noile abordări își impun obținerea unor structuri de conversie cu cost scăzut, flexibile și fiabile în exploatare și cu eficiență foarte mare. Depășirea limitei de eficiență Shockley–Queisser (33.7%), care a reprezentat un plafon de netrecut în primele două generații, este de asemenea obiectiv principal în domeniul celulelor solare din generația a treia.[negr1]. Domeniul abordării științifice este de asemenea mult mai larg decât la generațiile anterioare, apărând celule fabricate și prin alte tehnologii decât cele semiconductoră clasice: celule pe bază de compuși organici, de pigmenți, de polimeri. Cele mai importante categorii de celule fotovoltaice pe bază de semiconductori din generația a treia sunt: celule cu dot-uri cuantice, celule multijoncțiune, celule cu bandă interzisă intermediară, celule cu injecție de purtători fierbinți, celule cu straturi de nanocristale semiconductoră. Celulele solare pe bază de nanocristale prezintă o serie de avantaje față de cele actuale: preț scăzut datorită consumului redus de material și a maturării tehnologiilor de obținere de straturi de nanocristale, eficiență ridicată (valoare teoretică chiar la peste 65%)[negr2]. Eficiența ridicată a acestor celule se datorează a două fenomene principale care apar în nanocristale: primul—tunabilitatea benzii interzise, ea devine din ce în ce mai mare pe măsură ce dimensiunea nanocristalelor scade, iar timpul de relaxare al purtătorilor se mărește și el și al doilea—un foton adsorbit generează mai multe perechi electron-gol (Multiple Exciton Generation-MEG)[negr4]. Ca materiale studiate s-au impus Si, CdTe, CIGS, PbSe, GaAs, GaSb. În momentul de față eficiența celulelor cu nanocristale nu depășește câteva procente [negr3,negr5] și este mult sub potențialul teoretic calculat.

Celule solare cu semiconductori organici-Grätzel și colaboratorii au raportat că fabricarea celulelor solare trebuie efectuată în condiții atmosferice controlate și cu o umiditate relativă (RH) de <1% pentru a atinge rezultate consecvente și eficiență ridicată [leon3]. În general, acest tip de dispozitive se încapsulează pentru o mai bună durabilitate în timp. Procedul de încapsulare se realizează prin depunerea unui strat considerabil de rășină epoxidică deasupra întregii structuri peste care mai apoi se lipește un material, transparent, eventual rigid, de obicei sticlă. La celulele solare cu perovskit, procedul standard de încapsulare nu se poate aplica datorită sensibilității perovskitului la umezeală și solvenți polari, fiind deteriorate de însăși rășina de încapsulare. Pentru a preîntâmpina aceste deficiențe, diferite compozite formate din silicați sau argile dispersate într-o matrice polimerică au fost investigate ca materiale de barieră pentru umiditate și oxigen [leon4].

Actualmente materialul cel mai utilizat pentru realizarea de celule solare este siliciul cristalin, ce poate fi preparat sub mai multe forme. Celulele solare ce au la baza siliciu cristalin prezintă o eficiență de aproximativ 20%. Pentru a îmbunătăți eficiența s-au căutat noi materiale folosindu-se perovskiti ce prezintă o eficiență cuprinsă între 3 și ~20% însă nu prezintă stabilitate în timp. În același timp compuşii organometalici utilizați în astfel de structuri prezintă o eficiență mult mai mică: ~ 2-5% însă au o stabilitate mult mai mare comparabilă cu perovskiti. În anul 2009, Ning și colab. [ccio7] au obținut celule solare pe baza de complecși neutri cu iridiu, raportând o eficiență de 2.86 %. O eficiență de 11 % a fost pusă în evidență în 2008 de către F.Gao și colab. [ccio8] pe celule solare pe baza de compuşi cu ruteniu. Celulele solare organice reprezintă o alternativă promitoare pentru celulele solare anorganice în conversia energiei solare, dar pentru a deveni interesante din punct de vedere comercial, eficiența și timpul de viață al acestor dispozitive trebuie îmbunătățite. Dezvoltarea unor straturi active noi din materiale organice caracterizate de un spectru de absorbție a radiației solare optimizat, de nivele energetice adecvate care să ducă la reducerea barierelor energetice din interiorul structurii și de proprietăți bune de transport a purtătorilor de sarcină, reprezintă o alternativă pentru atingerea acestor obiective. Celulele solare organice sunt dispozitive excitonice caracterizate de generarea, sub acțiunea radiației absorbite, a unor perechi electron-gol puternic legate (excitoni). În cazul semiconductoarelor anorganice este favorizat procesul de disociere directă a perechilor electron-gol din cauza valorilor ridicate ale constantelor dielectrice, în timp ce în materialele organice, datorită constantelor dielectrice mai coborâte, disocierea are loc în principal la interfața dintre compusul donor și compusul acceptor. Compuşii donor și acceptor sunt caracterizați de valori diferite ale afinității electronice și potențialului de ionizare. Dintre celulele solare organice, celulele solare pe baza de polimeri deschid noi perspective deoarece se pot procesa dispozitive flexibile, ușoare, la un preț scăzut folosind tehnici din soluție [raso3]. Limitările introduse de lungimea de difuzie mică a excitonului în compuşii organici și de aria redusă a suprafeței contactului la interfața dintre straturile donor și acceptor în heterostructurile organice cu două straturi pot fi depășite folosind un strat activ mixt. Acest strat este format din amestecul a doi compuşi generându-se astfel o heterojuncțiune de volum (sau heterojuncțiune dispersată) care poate favoriza un transport mai eficient al purtătorilor de sarcină [raso4-raso7]. Pentru a crește eficiența trebuie selectate perechi adecvate donor-acceptor și configurații adecvate de dispozitiv bazate fie pe structuri bi-strat fie pe heterojuncțiuni de volum. Heterojuncțiunea de volum poate fi considerată ca un compozit bicomponent continuu donor-acceptor, având proprietatea de a maximiza aria de contact dintre cele două componente. Unul dintre cele mai importante avantaje ale celulelor solare cu heterojuncțiune de volum este că se pot obține straturi active mixte printr-un proces într-o singură etapă folosind tehnici de depunere din soluție. Principalele probleme asociate acestui tip de structură privesc optimizarea compuşilor organici folosiți din punct de vedere al poziției nivelelor asociate celui mai ridicat orbital molecular ocupat (HOMO) și celui mai coborât orbital molecular liber (LUMO) și controlul morfologiei stratului [raso8]. Stratul activ trebuie să prezinte o absorbție îmbunătățită peste un domeniu cât mai larg al spectrului solar și să asigure controlul proceselor implicate în generarea, transportul și colectarea purtătorilor liberi, procese ce au loc la interfața donor-acceptor și interfața strat activ/electrod. De aceea cei mai importanți parametrii avuți în vedere sunt lungimea de difuzie a excitonului și grosimea stratului în corelație cu proprietățile de absorbție ale acestuia. Structura de dispozitiv continuând un strat activ mixt poate să asigure obținerea unor parametrii electrice îmbunătățiți datorită probabilității crescute ca excitonul să ajungă la interfața donor-acceptor pentru a disocia și genera purtători liberi, deplasându-se pe o distanță mai scurtă decât lungimea sa de difuzie (10 nm). Pentru o difuzie eficientă a excitonului, o mobilitate a purtătorilor de sarcină și transfer al electronilor și golurilor la electrozi maxime, împachetarea la nivel molecular și mărirea domeniilor întrepătrunse ale celor două componente, donor și acceptor, adică morfologia la

nivel nano trebuie optimizate [raso9,raso10]. Cei mai studiat donori si acceptori, considerati compusi de referinta pentru un strat activ mixt, sunt poli(3-hexiltiofena)/P3HT si un derivat al fulerenei [6,6]-fenil C61 butiric acid metil ester/PCMB, caracterizat de o mare afinitate de electroni si de o mobilitate crescuta a purtatorilor de sarcina [raso16]. In literatura este mentionata metoda spin coating pentru obtinerea heterojonctiunilor de volum pentru aplicatii in conversia energiei solare. Nu au fost identificate insa referiri la structuri de celula solara cu strat activ mixt continand ca donori polimeri pe baza de carbazol si ca acceptor [6,6]-fenil C61 butiric acid butil ester, [C60]PCB-C4 (PCBB), caracterizat de o solubilitate mult crescuta in comparatie cu C60, ceea ce sustine obtinerea unei morfologii de strat mult imbunatatite. Materialele organice in structuri hibride sunt privite in ultima vreme ca si potentiali candidati in realizarea de structuri de celule fotovoltaice chiar daca din punct de vedere al eficientei de conversie sunt departe de structurile clasice bazate pe siliciu. Totusi daca pana nu demult se credea ca nu se poate obtine o eficienta mai mare de 10%, Heliatek a demonstrat ca aceasta poate fi depasita folosind materiale adecvate. Astfel cea mai buna eficienta raporatata este de 13.2% [soco1]. Este clar ca inca este loc de noi imbunatatiri care se pot obtine, fie folosind compusi noi fie arhitecturi mai complexe de celula. De asemenea, s-a aratat ca folosind structuri de celule hibride organic-anorganic combinand materialele organice cu semiconductori anorganici de tipul CdS [soco2], ZnO [soco3], TiO₂ [soco4], CdSe [soco5], CdTe[soco6] se pot exploata proprietatile materialelor organice (coeficienti mari de absorbtie, varietate de compusi, procesare usoara, costuri reduse, etc.) cu cele ale anorganicelor (mobilitate mare a purtatorilor de sarcina, stabilitate termica, etc.) [soco7]. Astfel se crede ca se poate combina banda de absorbtie a materialului organic cu cea a celui anorganic si se va obtine o imbunatatire a absorbtiei luminii in aceste materiale. Celulele hibride se pot obtine fie multi strat de tipul p-n (organic-anorganic) fie folosind nanostructuri de materialele anorganice si folosind conceptul de heterojonctiune bulk (BHJ) unde materialele sunt mixate in solutie. Astfel este necesara o metoda de depunere din solutie, cea mai folosita fiind spin-coating-ul. O metoda folosita un ultimii ani pentru a depune materiale „soft” este metoda MAPLE. Aceasta a fost folosita pentru a depune diverse materiale organice (oligomeri, polimeri, cu molecula mica). Totusi pana acum nu par sa existe date in ceea ce priveste depunerea de structuri hibride cu nanostructuri anorganice prin aceasta metoda cu materiale organice mic moleculare. La nivel international au fost raportate putine incercari de a obtine heterostructuri hibride prin MAPLE si s-au folosit cu precadere polimeri de tipul poly[2,6-(4,4-bis-(2-ethylhexyl)-4H-cyclopenta[2,1-b;3,4-b']dithiophene)-alt-4,7-(2,1,3-benzothiadiazole)] (PCPDTBT) cu CdSe si Poly[2-methoxy-5-(2'-ethylhexyloxy)-1,4-(1-cyano vinylene)phenylene tot cu CdSe [soco11-soco12]. In ceea ce priveste realizarea de heterostructuri hibride cu compusi organici mic moleculari nu am gasit referinte.

Water splitting-Creșterea cerințelor energetice la nivel mondial în ultimele decenii motivează oamenii de știință să caute alternative pentru procesele de producere a energiei pe bază de carbon, care sunt neprietenoase din punct de vedere al protecției mediului [flor1]. În această privință, electroliza apei în mediu alcalin, celulele de combustie și bateriile metal-aer sunt astăzi printre cele mai studiate resurse energetice de conversie și de stocare [flor2-flor6]. Până în prezent, există un interes deosebit în a găsi alternative adecvate cost/performanță echilibrate pentru soluțiile comerciale care conțin RuO₂ și IrO₂ și care sunt considerați cei mai activi electrocatalizatori pentru reacția de producere a oxigenului din apă [flor7-flor10]. În acest sens, oxizii și oxihidroxizii metalelor tranziționale 3d și, în special, materialele pe bază de Ni au atras o atenție considerabilă datorită costului scăzut și accesibilității lor [flor11-flor13]. Electrozi compoziți propuși în literatură conțin materiale diferite pe bază de Ni, cum ar fi: NiP₂, calcogenidele de Ni, oxizii sau oxihidroxizii de Ni, materiale care prezintă activități ridicate pentru producerea oxigenului la potențiale mici. Continuând această linie de cercetare, în cadrul acestui proiect ne propunem să utilizăm o metodologie generală pentru sinteza directă a unui electrocatalizator pe bază de Ni bine dispersat pe materialul oxidic nanostructurat mezoporos, pentru formarea unui material foarte activ și stabil pentru electroliză. Trebuie să remarcăm că aceste compozite pot cataliza OER fără alte modificări ale fazelor compoziționale sau dopajului cu metale nobile.

În domeniul fotocatalizei, reacția de descompunere a apei se numără printre cele mai studiate reacții, TiO₂ Evonik (fostul Degussa) P25 fiind considerat drept material de referință pentru o astfel de aplicație [neat2,neat3]. Odată cu introducerea conceptului de împerechere a diferiților semiconductori pentru reacția de descompunere a apei [neat4] s-au depus eforturi susținute pentru a dezvolta fotocatalizatori activi pentru acest proces.. Din acest punct de vedere, au fost proiectate heterostructuri de oxid diferite bazate pe TiO₂, cum ar fi oxizii metalici de tip n/n (de exemplu, ZnO/TiO₂) sau de tip p/n (de exemplu Cu₂O/TiO₂ sau NiO/TiO₂) [neat5,neat6]. În cel de-al doilea caz, în timpul acestui proces de împerechere,

semiconductorii sunt interfațați printr-o joncțiune p-n, unde benzile de energie sunt îndoite și nivelele Fermi sunt ajustate pentru a ajunge la un nou echilibru între difuzie și migrare. Deși majoritatea studiilor implică împerecherea a doi semiconductori, pregătirea și optimizarea structurilor tri-componente ar trebui să îmbunătățească eficiența fotocatalitică a acestor materiale. La ora actuală, majoritatea studiilor implică numai utilizarea unor sisteme bicomponente, un număr destul de restrâns fiind coordonate în direcția utilizării unor sisteme multicomponente [neat7]. Cu toate că eficiența acestor sisteme multicomponente este mult superioară celor formate prin împerecherea a doi semiconductori, natura complexă și costul mult prea ridicat a făcut ca trecerea la prepararea lor la scară largă să nu fie rentabilă din punct de vedere economic. Astfel, explorarea activității fotocatalitice a unui compozit cuprinzând diferiți oxizi metalici p și n și care să fie rentabil din punct de vedere economic prezintă un interes deosebit la nivel internațional.

Baterii-În ultimii ani studiul electrolitilor solizi s-a intensificat, propunându-se o varietate de materiale de la electroliti ceramici anorganici până la electroliti solizi din polimeri [borc8]. Pentru folosirea lor în producerea bateriilor solide se considera cei dintr-o matrice sticloasă dopată cu ioni de Li^+ [borc9, borc10] sau Na^+ [borc11, borc12], iar ca electrod se utilizează o folie metalică din elementele respective. Totuși, impedimentul principal în calea operațiunii bateriilor solide este rezistența mare la interfata electrozilor cu electrolitul. Astfel dezvoltarea unor electroliti solizi mai buni este crucială pentru a răspunde acestei provocări, dar la fel de importantă este îmbunătățirea proiectării structurale a bateriilor solide, prin valorificarea proprietăților nanomaterialelor și a proceselor la scară nanometrică.

Stocare hidrogen- Hidrurile metalice, ca MgH_2 , NaAlH_4 , LiAlH_4 , LiH , LaNi_5H_6 , TiFeH_2 sau PdH_x pot fi folosite ca mediu de stocare reversibilă pentru hidrogen cu diferite eficiențe. Cele mai multe hidruri metalice au legături puternice între metal și hidrogen; în consecință, temperaturi relativ ridicate (120 – 200 °C) sunt necesare pentru a elibera hidrogenul. Acest cost energetic poate fi redus prin folosirea de aliaje care combină un formator de hidură puternic și unul slab, cum ar fi LiNH_2 , LiBH_4 și NaBH_4 . Recurgerea la sisteme cu legături metal – hidrogen prea slabe nu este nici ea adecvată, pentru că atunci presiunea necesară re-hidrării este prea ridicată. O altă metodă care se ia în calcul în momentul actual este doparea cu activatori. Aceasta, de exemplu, a fost implementată cu succes în cazul hidrurii de aluminiu, însă există și aspecte mai puțin dorite legate de acest material, cum ar fi sinteza prea complicată sau încărcarea dificilă cu hidrogen. În momentul actual, singurele hidruri capabile să ajungă la un conținut gravimetric de 9 % sunt bazate pe compuși de litiu, bor și aluminiu. Domeniul fiind de importanță strategică și comercială, soluțiile care sunt implementate de marii producători de automobile (de exemplu Daimler) sunt secrete.

Tratament reziduuri-Biomineralizarea contaminanților din apă și sol este un subiect intens studiat datorită gradului mare de industrializare la nivel global. Cercetări privind noi tehnici de bioremediere sau dezvoltarea de bioindicatori al gradului de poluare se realizează în toate țările industrializate. Folosind platforma Web of Science, au fost identificate doar cinci grupuri de cercetare din Franța, Italia, Canada, India și Egipt/Arabia Saudita care au folosit foraminifera ca bioindicatori de poluare. Bioremedierea prin intermediul cianobacteriilor a fost investigată de laboratoare din numeroase țări, precum Italia, Portugalia, China, SUA, India, Brazilia, Japonia, Malaezia, Irlanda, Scotia. Nu au fost investigate studii privind biomineralizarea indusă prin iradierea cu raze X. Activitatea minieră produce, datorită specificității sale, multiple efecte negative asupra mediului, cele mai importante fiind: a) contaminarea apelor curgătoare (de suprafață sau a pânzei freatice) cu metale grele ce conduce la influențe negative asupra populației, florei și faunei din zonă; b) contaminarea chimică a solului ce afectează fertilitatea acestuia pentru o perioadă lungă de timp. Procesele de dispersie pe scară mare a metalelor grele, cum ar fi Pb, Cd, As și metalele 3d, prin intermediul scurgerilor acide din exploatarea minieră afectează aproximativ 0.3% din teritoriul Uniunii Europene [Eurostat 2011]. Un efect secundar al poluării solului și apei de mine și alte activități industriale este diminuarea acoperirii cu vegetația a pământului și scăderea fixării azotului și carbonului în plantele rizosferei. Conform statisticilor Agenției Naționale pentru Resurse Minerale [mara1], în România sunt în vigoare 626 de licențe/permise de exploatare pentru minereuri, dar există și multe mine dezafectate. Numărul mare de locații unde au avut sau au loc activități miniere indică și potențialul risc asupra unui procent important din populația țării. Cercetări anterioare au demonstrat că organismele unicelulare sunt capabile să încorporeze Zn și alte metale grele în procesele lor de biomineralizare. Acest lucru apare prin formarea de către cianobacterii a biomineralelor de carbonat sau silicat de Zn [mara2-mara7] ceea ce este de interes pentru tehnicile de bioremediere. În plus, cantități mici (zeci până la sute de ppm) de Zn și alte metale grele pot fi încorporate

in timpul proceselor intra si extracelulare de catre foraminiferele bentonice care par a fi candidati promitatori ca bio-indicatori de mediu [mara8,mara9].

Procesele de biomineralizare pot impartite in doua clase: mineralizarea indusa biologic si mineralizarea controlata biologic, in ultimul caz formarea mineralelor fiind mediata de matrici organice [mara10]. Studii recente au aratat ca iradierea cu raze X stimuleaza si accelereaza mineralizarea [mara11]. Acest fapt este o problema importanta deoarece biomineralizarea crescuta sub influenta iradierii cu raze X poate deschide cai originale catre biomonitorizarea iradierilor si/sau eliminarea deseurilor nucleare.

TIC si Spațiu-Securitate:

Fotodetectori-Piroelectrici: Pe plan international exista de asemenea un interes crescut pentru studiul materialelor feroelectrice fara plumb in vederea inlocuirii materialelor actuale si obtinerea unor dispozitive *lead-free*. Cel mai mult au fost studiate aceste materiale sub forma masiva, dar creste interesul pentru filme subtiri, in special pentru ca acestea genereaza fenomene complexe, care nu sunt pe deplin intelese (interfete, curenti de scurgere, contributii extrinseci la valoarea semnalului piroelectric total). Este deschisa astfel o noua directie de cercetare, cea a studiului materialelor fara plumb, care nu dauneaza mediului si sanatatii umane, in care se cauta metode de preparare cu costuri scazute si utilizarea de elemente abundente in natura.

Problematica materialelor feroelectrice fara plumb este intens studiata in ultimul timp cu scopul inlocuirii materialelor toxice, cu continut de plumb (ex. PZT), utilizate cu preponderenta in aplicatii pentru detectia radiatiei IR, reducandu-se astfel impactul asupra mediului si sanatatii umane. Au fost realizate studii in special pe materiale masive [bote1][bote2]. Acest tip de materiale au fost destul de putin studiate sub forma de filme subtiri, mai ales din punct de vedere al proprietatilor piroelectrice [bote3]. In cazul structurilor cu filme subtiri bazate pe plumb, s-a aratat ca anumiti factori, cum ar fi formarea domeniilor, contribuie la semnificativ la cresterea performantelor piroelectrice [bote4][bote5]. Este interesant de studiat cum poate fi optimizat raspunsul piroelectric prin controlul calitatii filmelor, al interfetelor, al tipului de substrat folosit, in cazul structurilor cu filme subtiri din materiale „eco-friendly”.

Semiconductori pentru fotodetectie: Imagistica termica prezinta un camp larg de aplicatii pentru aparare si uz comercial gratie reusitei in realizarea de matrici de detectori plan focal ce nu necesita racire. Aceste sisteme de infrarosu (IR) lucreaza in general in domeniul de lungimi unda de 8-12 μm si fructifica faptul ca intensitatea maxima a radiatiei IR emisa de toate obiectele ce se afla la temperaturi apropiate de cea a camerei se afla in acest interval de lungimi de unda, iar atmosfera ambianta de asemenea este transparenta pentru aceste lungimi de unda (a treia fereastră de transparenta a atmosferei ambiante). Foarte putine materiale sunt transparente in aceasta fereastră de lungimi de unda a radiatiei electromagnetice (pentru a fi folosite ca si lentile IR) iar unele dintre ele sunt si foarte scumpe de produs (de exemplu elementele optice produse din monocristal de germaniu).

Avantajele sticlelor calcogenice: (i) spre deosebire de materialele mono- sau poli-cristaline (utilizate curent pentru aplicatii in domeniul infrarosului mediu: Ge monocristalin, ZnSe policristalin) sticlele calcogenice au avantajul ca pot fi modelate in elemente optice prin simpla incalzire deasupra temperaturii lor de tranzitie a sticlei (T_g); (ii) sticlele calcogenice sunt relativ usor de sintetizat ceea ce permite un cost mic de productie a materialelor de baza ce vor fi folosite ulterior pentru elemente optice.

Dezavantajul principal al sticlelor calcogenice este că ele posedă proprietati mecanice (duritate, rezilienta, etc.) care sunt relativ mai slabe decat ale materialelor mono- si policristaline.

Tehnica de sinterizare in plasma de scanteie (Spark Plasma Sintering - SPS) are avantajul fata de simpla presare la cald (care necesita presarea pulberii cateva minute la o temperatura mai mare cu 100 °C decat temperatura de inmuire - T_g) ca permite sinterizarea la o temperatura mai mare cu doar 10 pana la 30 °C decat T_g pentru un interval de timp de la cateva secunde pana la cateva minute cu o rata mare de incalzire (100 °C/min), evitandu-se cristalizarea sticlei.

Pe plan international exista putine raportari ale producerii de sticle calcogenice transparente in IR prin metoda de sinterizare in plasma de scanteie (Spark Plasma Sintering - SPS). Exista un grup de cercetare in cadrul Universitatii din Rennes, Franta (cu care INCDFM are deja contact prin Dr. Laurent Calvez) care a inceput sa foloseasca alierea mecanica si tehnica SPS de curand [sava4, sava5]. Dansii au reusit sa produca discuri de sticla calcogenica cu diametre de pana la 3.6 cm, de compozitie $80\text{GeSe}_2\text{--}20\text{Ga}_2\text{Se}_3$ transparente in IR pana la 16 μm .

TiO_2 este un material cu o gama larga de aplicatii, de exemplu fotocatalizatori [slav1, slav2], celule solare cu coloranti sau pe baza de perovskiti [slav3, slav4], acumulatori electrici [slav5], senzori de gaze [slav6] si dispozitive biomedicale [slav7]. Caracteristicile care fac acest material foarte atractiv sunt stabilitatea

chimica, rezistenta mecanica, activitatea fotocatalitica si faptul ca este prietenos cu mediul. Largimea benzii interzise a TiO_2 de aprox. 3,2 eV face ca, in aplicatiile care implica proprietatile fotoelectrice, sensibilitatea acestui material sa fie limitata in domeniul UV. Pentru aceasta, o solutie propusa in literatura de specialitate este folosirea de straturi cu NC de Ge in heterojunctiuni cu straturi de TiO_2 [slav8].

Detectori de radiatii- Detectorii de radiatie nucleara sunt importanti pentru o varietate de aplicatii precum: analizele nucleare, securitatea populatiei in fata amenintarii teroriste, monitorizarea respectarii tratatelor internationale de neproliferare a armelor nucleare, monitorizarea pe termen lung a localizarii amplasamentelor nucleare (ex: Centrale nucleare-electrice), imagistica medicala, radioterapia, protectia mediului, defectoscopia industrial, fizica energiilor inalte. Un detector nuclear ideal ar trebui sa combine un numar de caracteristici care in prezent sunt distribuite intre diferite tipuri de detector, cum ar fi: rezolutie energetica ridicata, sensibilitate inalta, eficienta ridicata, functionare la temperatura camerei, scalare, robuste si fiabilitate. In acest sens, putem mentiona ca o rezolutie inalta mai buna de 0.2% la 1.33 MeV poate fi atinsa folosind detectorii monocristalini de Ge [ghit1] (M.Katagiri et al - 2003); dar este necesara o racier a detectorului la 110 K. Detectorii din CdZnTe au performante bune la temperatura camerei cu o rezolutie in energie de 1% la 662 keV [ghit2] (L.Verger et al-2005) dar dimensiunea lor lineara este limitata la cativa cm. Cel mai raspandit detector este cristalul scintillator NaI:Tl^+ care poate fi obtinut la dimensiuni mari si are functionare la temperatura camerei, dar are o rezolutie energetica slaba de $6\div 7\%$ la 662 keV, este puternic higroscopic si are rezistenta slaba la socuri [ghit3] (K.S.Shah et al- 2004). In acest sens, compromisurile care se fac in cadrul unui experiment la stabilirea detectorului sunt cu atat mai importante cu cat sunt considerati si alti parametri precum: viteza de raspuns ridicata, pret scazut, proportionalitate buna, eficienta de stopare ridicata, portabilitate, rezistenta mecanica. In momentul de fata se crede ca domeniul nanotehnologiei ofera perspective pentru a satisface aceste cerinte competitive. Nanodispozitivele au suscit un interes crescand in ultimul timp in ceea ce priveste aplicatii biomedicale, senzori biochimici sau optoelectronica. Putem spune pe baza datelor preliminare ca dezvoltarea nanomaterialelor pentru aplicatii in detectia nucleara poate aduce imbunatatiri substantiale in ceea ce priveste costul detectorului, fiabilitatea si performantele acestuia. Astfel, in comparatie cu monocristalele sau cu particulele scintilatoare de dimensiuni micrometrice, nanocristalele (NC) ofera perspectiva de imbunatatire a performantelor.

Senzori gaze-Materialul clasic, care se cunoaste de multi ani, este SnO_2 , a fost dezvoltat la nivel avansat de cercetatori din Japonia [lori1,lori2]. Institute de cercetare si firme din Germania au dezvoltat suportii din alumina pentru electrozi de platina in geometria de pieptene, cu circuit de incalzire pe spate, care asigura selectia regimului termic de lucru al senzorului. Ceea ce se cauta pe plan mondial, sunt materiale alternative la SnO_2 , care sa nu necesite incalzire, ori sa necesite atat de putina incalzire, incat sa se poata efectua chiar si de la o baterie, pentru aplicatii in teren, departe de surse de tensiune la retea. Ca materiale propuse mai recent pe plan mondial pentru sensibilitate la diverse gaze, amintim oxidul de wolfram, fire de diversi oxizi metalici, materiale cu adaos de- sau pe baza de grafene, pyrol sau porfirine simple sau metalo-porfirine. Pe plan international, exista un interes crescut de multi ani, pentru studiul materialelor sensibile la diferitele specii de gaze. Sunt grupuri cu traditie in Japonia, Finlanda, Germania [lori6, lori7], Franta, Republica Moldova [lori6, lori7], Olanda, si Statele Unite ale Americii [lori8]. In ultimii ani se observa insa o crestere pronuntata a contributiilor in aceasta tema, provenite din China [lori9, lori10].

Senzorii chimici sunt disponibili in numeroase aplicatii practice dar sensibilitatea si selectivitatea acestora sunt ridicate doar pentru anumite substante. In ciuda necesitatii unui material foarte sensibil pentru detectia de NO_x , nici un senzor din cei disponibili nu posedă o sensibilitate sub 1 ppm oxizi de azot in aer sau in apa. Selectivitatea senzorilor in cazul amestecurilor de gaze este de asemenea o problema foarte provocatoare. Recent, interesul in poluanții mediului inconjurător precum si monitorizarea acestora a crescut considerabil. Oxizii de azot, precum NO si NO_2 , sunt poluanții tipici ai mediului inconjurător. Există o foarte mare cerere de senzori mai mici, mai ieftini si cu inalta sensibilitate si selectivitate privind aceste gaze toxice. Nanotuburile de carbon par a fi noi materiale sensibile in detectia de gaze cu rezultate remarcabile la temperatura camerei, raspuns rapid si selectivitate.[sima1, sima2] Nanotuburile de carbon cu un singur perete functionalizate de exemplu cu poly(ethyleneamine) au fost folosite cu succes in alcatuirea senzorilor de NO_2 . [sima3,sima4] Oxidul de azot, NO , a fost in primul rand oxidat in NO_2 , care a fost apoi trecut printr-o retea de nanotuburi de carbon cu un singur perete intr-un dispozitiv tranzistor cu efect de câmp, inducând astfel schimbări in conductia electrica a nanotuburilor. Porfirinele prezintă o uimitoare capacitate de adsorbție, suplimentar ele sunt caracterizate

și de mare selectivitate și sensibilitate cea ce le recomanda în sisteme de sensing. Deși largă selectivitate a acestor tipuri de materiale este strâns legată de legăturile slabe (legături Van der Waals și legături de hidrogen), porfirinele pot crea legături mai puternice din cauza coordinației analiților. Un exemplu de interferență a acestor tipuri de interacțiuni duble, care generează izoterma de adsorbție neliniară, este interacțiunea specifică $\pi - \pi$ între sistemele aromatice ale porfirinei și analiților aromatici, precum benzenul.[sima5] Rețelele de nanotuburi de carbon pot fi funcționalizate cu diferiți agenți ce pot induce caracteristici mai bune de performanță, cum ar fi selectivitatea, sensibilitatea, etc. [sima6-sima9] Recent a fost semnalată folosirea nanotuburilor de carbon cu efect de câmp tranzistor ca și detectoare de lumină.[sima10] Nanotuburile de carbon au fost funcționalizate necovalent cu porfiringa de zinc prin picurarea soluției de porfiringă pe rețeaua de nanotuburi de carbon. La iluminare, a fost semnalată o schimbare a tensiunii de prag spre tensiuni pozitive, indicând efectul dopajului cu goluri a nanotuburilor de carbon.

Microunde-Pe plan internațional, pentru microunde de frecvențe scăzute, pe plan internațional sunt oferite dispozitive programabile pentru mai multe canale în pași de 0.25, 0.5 sau 1 dB pentru atenuatoare și cu o precizie de 1,5 grade pentru defazoare. Totuși, arhitectura acestor dispozitive este limitată la domeniul de frecvențe joase: ~6 GHz atenuatoare sau ~ 3GHz pentru defazoare. Pe de altă parte, atenuatoarele cu diode PIN sunt în general limitate la 16 GHz. De asemenea, dispozitivele de tip atenuatoare de THz cu straturi subțiri pot asigura atenuări în transmisie de 30%, 10%, 3% și 1%, dar sunt limitate la banda de frecvență de 0.1 - 2 THz.

Materialele dielectrice cu permitivitate electrică ridicată, pierderi reduse și deriva termică controlată au contribuit în mod decisiv la expansiunea comunicațiilor fără fir, având un puternic impact în evoluția dispozitivelor pasive de microunde [nede1]. Dintre acestea, dielectricii cu pierderi reduse din familia niobatilor au fost studiați în ultimii ani datorită costului redus al materiei prime și a temperaturilor de procesare nu foarte ridicate [nede2]. Se vor sintetiza și caracteriza materiale dielectrice pe baza de niobiu cu pierderi reduse în microunde pentru integrarea acestora în componente selective/radiante. Esantioane cu parametri dielectrice adecvați vor fi utilizate pentru modelarea, proiectarea, realizarea și caracterizarea componentelor pasive de microunde. Datorită costului redus al materiei prime și a temperaturilor de procesare nu foarte ridicate, materiale dielectrice de microunde pe baza de niobiu au fost studiate la nivel internațional în vederea înlocuirii compusilor pe baza de tantal [nede2]. Sunt vizate o serie de probleme științifice și aplicative, neabordate la nivel național.

Memorii-Capacitive: Tendința de miniaturizare anticipată de G. Moore în 1975 [pala1] este puternic afectată de fenomenele care au loc la scară nanometrică. Astfel, SiO_2 folosit ca oxid de tunelare în structurile MOS a atins limita de grosime (2 nm) pentru care curentul de scurgere datorat tunelării purtătorilor din poarta flotantă în substratul de Si este dominant ceea ce conduce la imposibilitatea structurilor de memorie de a reține sarcina electrică. Soluția constă în utilizarea de oxizi cu constantă dielectrică mai mare cum ar fi HfO_2 , ZrO_2 [pala2, pala3], permițând grosimi mai mari ale stratului de tunelare însă cu o valoare a grosimii oxidului echivalent mult mai mică decât cea corespunzătoare SiO_2 ca oxid de tunelare. De asemenea se impune folosirea unui strat cu rol de poarta flotantă discretă, format din NC în locul unui strat continuu datorită problemelor de durabilitate pe care acesta din urmă le ridică [pala4]. În cazul unei porți flotante discrete, distanța între NC este suficient de mare pentru a preveni conductia laterală, ceea ce înseamnă că la apariția unui canal de scurgere între un NC și substratul de Si stocarea de sarcină a structurii de memorie nu este afectată. Avantajul utilizării NC de Ge față de cele de Si este acela că NC de Ge prezintă un efect de confinare cuantică mai puternică la aceleași dimensiuni ale NC [pala5], deoarece raza Bohr excitonică este de aproximativ 5 ori mai mare în cazul Ge față de Si. Mai mult decât atât, deoarece Ge și Si sunt materiale complet miscibile banda interzisă a NC de GeSi poate fi ajustată în funcție de concentrația relativă a celor două materiale [pala6]. Sunt necesare studii aprofundate pentru îmbunătățirea proprietăților de memorie folosind noi abordări experimentale prin controlul morfologiei centrilor de stocare și utilizarea altor oxizi suplimentar față de SiO_2 , HfO_2 . Pe plan internațional au fost raportate structuri de memorie cu NC de HfO_2 în matrice de SiO_2 [pala7] sau NC de Ge în matrice de HfO_2/SiN [pala8]. Rezultate mai recente [pala9] se referă la proprietăți de memorie pe structuri cu trei straturi formate din NC de Ge înglobate în HfO_2 obținute prin pulverizare cu magnetron (PM) în care formarea NC de Ge este indusă prin tratament termic rapid (RTA) sau iradiere cu ioni de Au sau Ni. Problema care trebuie rezolvată atunci când se folosesc oxizi cu constantă dielectrică ridicată este data de temperatura lor de cristalizare care este relativ joasă (~ 450 °C) și împiedică formarea de NC

de Ge. O soluție ar fi doparea straturilor de oxid cu Si pentru creșterea temperaturii de cristalizare a oxidului [pala10], însă acest lucru ar duce la scăderea constantei sale dielectrice.

Materiale feroelectrice și multiferice: Această clasă de materiale sunt intens studiate de peste două decenii, însă înțelegerea proprietăților lor fundamentale este de dată recentă, atât prin studii teoretice *ab initio*, cât mai ales prin noile metode experimentale (depunerea din pulsuri laser cuplata cu metode microscopice și spectroscopice avansate) care sunt capabile să sintetizeze structuri cât mai apropiate de cazurile ideale studiate teoretic, adică straturi subțiri monocristaline, respectând stoichiometria materialului și fără contaminanți. În literatură se cunoaște efectul strain-ului asupra proprietăților macroscopice feroelectrice și dielectrice a filmelor subțiri epitaxiale (polarizare remanentă, câmp coercitiv, constanta dielectrică, temperatură Curie etc.) [boni10]–[boni13], dar efectul gradientilor de strain ce pot determina câmpuri interne flexoelectrice [boni14]–[boni17] este mai puțin cunoscut și studiat. Ca exemplu, ferita de bismut (BiFeO_3) face parte din categoria materialelor cu proprietăți multiferice intrinseci la temperatura camerei. Datorită proprietăților feroelectrice, antiferomagnetice și ferroelastice [hrib1], [hrib2] acest material a fost intens studiat în ultimii ani. Din păcate prezenta curentilor de scurgeri din aceste materiale împiedică folosirea lor în aplicații practice. Cauzele scaderii rezistivității electrice sunt considerate a fi prezenta simultană a ionilor Fe^{2+} și Fe^{3+} ceea ce duce la apariția vacanțelor de oxigen și a mecanismului de conducție în salturi [hrib3] dar și a volatilității Bi care duce la apariția vacanțelor de bismut și a fazelor secundare [hrib4]. O metodă de scădere a valorilor curentilor de scurgeri este prin dopaj cu diverși ioni cum ar fi Mn [hrib5] sau Ti [hrib6]. De asemenea, în cadrul INCDFM s-a obținut recent o corelație între feromagnetism și o anumită orientare a polarizării în zircotitanat de plumb dopate cu mangan (rezultate trimise la publicare).

Materiale de tip semiconductor magnetic diluat: Pe plan internațional, datele din literatură relevă că o dată cu descoperirea magnetismului în structuri ca InAs și GaAs, materialele semiconductoare magnetice la temperatura camerei au câștigat o atenție deosebită din partea comunității științifice și industriale din sectorul electronicii, din pricina aplicațiilor tehnologice deosebit de promițătoare pe care le au acestea în electronica bazată pe purtători de sarcină polarizați în spin, multe asemenea materiale fiind sintetizate, în special semiconductori de tipurile $A^{\text{III}}B^{\text{V}}$, $A^{\text{IV}}B^{\text{VI}}$, $A^{\text{II}}B^{\text{IV}}$ [lung1-lung3]. Mai recent, a căpătat o mai mare importanță sintetizarea unor materiale de tip semiconductor magnetic obținute prin doparea de ioni magnetici (tot Mn, de obicei, datorită momentului său magnetic de $5 \mu_B$, cel mai mare între metalele de tranziție) în semiconductori elemental precum Si și Ge, având în vedere că tehnologia actuală în electronică este bazată pe siliciu, iar germaniul are aceeași structură cristalină cu a Si [lung4, lung5]. Tendința care se manifestă în literatură este de a căuta rețete de materiale cu proprietăți de semiconductor magnetic diluat care să manifeste proprietăți feromagnetice la temperatura camerei, cu temperaturi Curie cât mult peste a camerei, evitându-se pe cât posibil segregarea ionilor magnetici în materialul semiconductor gazdă prin așa-numita nanodecompoziție spinodală [lung6, lung7]. În aceeași perioadă, s-a sugerat că încorporarea de carbon în sisteme MnGe sau MnSi ar induce ordonarea feromagnetică în acestea la temperatura camerei, având în același timp temperaturi Curie peste cea a camerei [lung8-lung10].

Tranzistori, LED-uri, contacte- Tranzistorii organici emitori de lumină reprezintă o nouă clasă de dispozitive optoelectronice cu un impact tehnologic ridicat. În aceste dispozitive, emisia de lumină poate fi îmbunătățită prin modificarea caracteristicilor sursă-drenă precum și a dielectricului de poartă. Swensen și colab. au realizat în 2005 prima activitate de cercetare care demonstrează fezabilitatea unui OLET ambipolar pe baza de polimeri de tip poly-phenylenevinylene (numit Super Yellow) pe substrat de Si/SiO₂. Pe aceste tipuri de structuri au fost folosiți electrozi metalici cu lucru de extracție mic (Ca) pentru injecție de tip n și electrozi de Ag cu lucru de extracție ridicat pentru asigurarea injecției de tip p. S-a observat o zonă de recombinare spațială în condiții ambipolare controlate de către polaritatea porții. Zona de emisie se deplasează pe canal pe măsura ce polaritatea porții este modificată. În cazul în care există un echilibru între purtătorii de sarcină, electroni și respectiv goluri, recombinarea are loc în centrul canalului [icio4]. Mai târziu, în 2008, Zaumseil și colab. au obținut OLET-uri ambipolare pe baza de polimeri de tip F8BT și F8TBT obținând un randament cuantic de emisie de 0.8 % [icio5]. Capelli și colab., în 2008, au obținut OLET-uri folosind ca și strat activ compusi cu molecula mica, luminescenti de tip DHCO4T. Ca strat dielectric a fost folosit PMMA depus pe SiO₂. Fenomenul de electroluminescență a fost observat în cazul acestor dispozitive, dar pentru un transport unipolar [icio2].

Tehnologii pentru sisteme 2D

Există preocupări privind evaporarea directă a carbonului pentru realizarea de straturi grafenice în condiții de epitaxie din fascicul molecular (MBE), prin așa-numita “Carbon – MBE” [tach1,tach2]. Pentru aceasta, se folosesc evaporatoare prin bombardament electronic al unui vârf de carbon, în condiții de bună direcționare a fluxului de electroni spre un asemenea vârf, folosindu-se o electrodă repulsivă de tip “whenelt”. Unul dintre propunătorii acestei Faze a dezvoltat un astfel de evaporator în cursul tezei de doctorat, susținută la Universitatea din Trieste. Acest evaporator a folosit la obținerea de noi rezultate privind straturi de tip grafenic depus pe suprafețe feroelectrice [tach3] sau formarea de agregate moleculare de carbon pe suprafețe metalice [tach4].

Acoperiri pentru aerospațiale-Principalii protagoniști pe plan internațional sunt reprezentați de firmele producătoare de motoare cu turbină pentru industria aeronautică și industria energetică (uzine producătoare de curent electric cu motoare turbine staționate la sol), în special din SUA: General Electric, McDonnell Douglas – Boeing; din Europa: Rolls-Royce, Airbus, BAE Systems; din Rusia: Mikoyan and Sukhoi Design Bureaus; și din Japonia și China. La ora actuală folosirea YSZ limitează temperatura maximă de lucru pentru structurile TBC la 1350 °C, temperatura peste care au loc transformări structurale a zirconiei din faza cubică în faze tetragonale [merc1, merc2] cu modificări de volum a celulei unitare care conduc la microfisuri și degradarea mecanică a structurilor: microfisuri, delaminări, fluaj și scăderea rezistenței la oboseală. Pentru depășirea acestei limite de temperatură s-au propus la renunțarea structurilor TBC și realizarea componentelor de turbină integral din aliaje de MoSi_2 [merc3] și folosirea de materiale ceramice compozite (Ceramic Matrix Compozite) [merc4, merc5]. Odată cu dezvoltarea structurilor de barieră termică problematică a evoluat către rezolvarea de probleme conexe, cum ar fi impurificarea suprafețelor depuse cu YSZ cu compusi proveniți din nisipuri, în special cu Ca, Mg, Al, Si (CMAS) [merc6] și formarea de compusi la temperaturi de lucru de peste 1000 °C. Pentru a împiedica difuzia CMAS în volumul YSZ se folosesc la ora actuală compusi ternari/quaternari și multifazici de zirconie, ytrie, gadolinie, niobati și cerie. La ora actuală această problematică se cunoaște sub denumirea de Environmental Barrier Coatings [merc7]. Materialele propuse sunt încă în faze de teste de laborator, dar pentru a putea propune o soluție tehnică capabilă să reziste la peste 10 000 de ore de funcționare sunt necesari ani de testări de duranță.

2.3. Contribuția științifică/tehnică:

Tema 1:

- Elaborarea unui protocol experimental pentru prepararea izolatorului topologic YBO. Prepararea de straturi subțiri de YBiO_3 care este un izolator topologic atunci când este stabilizat în faza tetragonală. Această procedură permite în mod natural crearea de interfete cu supraconductori de tip LaBaCuO_4 și $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$, depuși prin depunere în laser pulsant. Interfețele izolatorilor topologici cu supraconductorii ar putea pune în evidență stări exotice cu fermioni Majorana. Aceste stări cu fermioni care sunt propriile lor antiparticule au fost prezise teoretic însă confirmarea experimentală este așteptată.
- Creșterea de straturi subțiri feroelectrice în geometrie capacitor, precum și a heterostructurilor care includ cel puțin un strat feroelectric. Studiul fenomenului de capacitate negativă
- Demonstrarea abilității fotoluminescenței în evaluarea proceselor de reticulare ale fotorezistului SU8, induse termic și respective în prezența luminii UV în prezența nanoparticulelor de carbon.
- Sintetizarea pe cale electrochimică a compozitului de fosforena și polidifenilamina în vederea evidențierii proprietăților optice. O atenție specială va fi acordată: i) evaluării proceselor de funcționalizare a fosforenei cu polidifenilamina prin spectroscopia Raman/SERS și FTIR; ii) studiilor corelate de spectroscopie de absorbție UV-VIS-NIR și fotoluminescență în vederea determinării numărului de straturi care au fost funcționalizate cu polidifenilamina; iii) evidențierii rolului fosforenei asupra fotoluminescenței polidifenilaminei și iv) ilustrării proprietăților fotoluminescente anizotrope ale polidifenilaminei în absența și în prezența fosforenei.
- Studiul condițiilor de existență a zerourilor grele ale conductanței electrice în doturi cuantice de grafena și molecule. Ne propunem elaborarea unei teorii care să explice apariția fenomenului într-o varietate mai largă de sisteme bipartite, prin abordarea acestuia ca un efect de anulare a transportului în conductori Fano legați în serie.
- Studiul stărilor de margine în structuri complexe și rețele bidimensionale din categoria grafenei sau fosforenei, cu margini zig-zag sau alte tipuri de configurații de margine. La variația parametrului de hopping la margine, sistemul se transformă din periodic în sistem cu margini. Urmărind proprietatea de localizare pe margine, ne dorim stabilirea unei legături între localizarea pe margine și legăturile de hopping rupte care duc la apariția acestora.

- Pentru realizarea practica a unor structuri din straturi (ultra)subtiri cu stari multiple de polarizare, vom aplica teoria Landau-Ginzburg-Devonshire luand in considerare contributiile mecanismelor fizice fundamentale pentru descrierea fenomenului de histerezis in sisteme multistrat. Modelul teroretic astfel dezvoltat va fi rafinat prin aplicarea ecuatiilor obtinute la fitarea datelor experimentale masurate pe o multitudine de structuri realizate in laborator si stabilirea ponderilor factorilor initial asumati. In continuare, modelul va fi utilizat pentru predictia unor noi tipuri de structuri heteroepitaxiale cu stari energetice multiple.
- Elaborarea unei descrieri conceptuale, pana la elemente de detaliu, necesare pentru realizarea unor noi sisteme senzoriale pe baza de heterostructuri cu proprietati feroice, cu functii de raspuns specifice la factori externi aplicati. Un obiectiv major il constituie determinarea precisa a contributiei datorita bulk-ului stratului si a celei datorate interfetelor, la raspunsul global, in functie de dimensiunile caracteristice ale acestora. Vor fi explorate efectele polarizarii, magnetismului de spin si ale starilor de interfata.
- In cadrul cercetarilor vizand realizarea de celule solare cu mare eficienta a conversiei energetice vom investiga proprietatilor fotoferoice si de conductie de purtatori ale unor interfete in sistemele BaSnO_3 - MAPbI_3 si BaTiO_3 -IL- MAPbI_3 (IL= strat intermediar). Realizarea obiectivului general implica realizarea unei pleiade de obiective derivate: i) obtinerea unei valori semnificative si stabile a a polarizarii feroelectrice; ii) determinarea distributiilor de sarcina si potential in heterostructuri; iii) determinarea schemei de aliniere a benzilor de energie la interfete; iv) determinarea relatiei dintre dipolul de interfata si nivelele marginilor de benzi; v) evaluarea potentialelor de ionizare; vi) evaluarea proprietatilor de conductie de purtatori, optimizarea dimensionala.
- Investigarea proceselor de renormare a masei efective a electronilor la interfata metal-feroelectric folosind spectroscopia de fotoelectroni rezolvata unghiular (ARPES). Sistemul va fi preparat pe substrat de SrTiO_3 (STO) cu orientarea (111), folosind depunerea in laser pulsant. Aceasta metoda conduce la cresterea epitaxiala a oxizilor, in particular $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ (LSMO) drept componenta metalica, acoperit cu un strat subtire feroelectric PbZrTiO_3 (PZT). Elucidarea efectelor care contribuie la renormalizarea masei efective (interactie electron-fonon sau interactii de tip multiparticula) are impact direct in intelegerea modului cum pot fi controlati curentii de tunelare si conductia in jonctiuni multiferoice.
- Studiul proceselor de polarizare electrică în sisteme organice. Folosirea a diferite unități moleculare polare pentru prepararea prin metode fizice și/sau chimice a diferite sisteme și studiul efectelor de structură, mărime, polaritate și polarizabilitate asupra proprietăților electrice și a mecanismelor de funcționare. Găsirea parametrilor optimi de preparare a probelor organice prin evaporare termică a diferite molecule polare, întâlnite în natură, cu posibile proprietăți electrice (diferite nucleobaze ale ADN si ARN, alanina, glicina, acidul poli-lactic) pe substraturi metalice (care constituie unul din electrozi)
- Explorarea structurii electronice a oxizilor de mangan in structura perovskit in perspectiva aplicatiilor acestora in transportul electronic dependent de spin si in dispozitive cu anizotropie magnetica controlate prin intermediul tensiunilor electrice (se va folosi spectroscopia de fotoelectroni excitati cu raze X moi (300-1000 eV) rezolvata unghiular – SX-ARPES). Elucidarea legaturii dintre concentratia de purtatori, tipul de conductie (n sau p) si mecanisme de interactie electron-fonon ce limiteaza mobilitatea purtatorilor de sarcina in aceste tipuri de material. Determinarea explicita a functiei spectrale ale electronilor de la nivelul Fermi, a legilor de dispersie $E(k)$ si a semnaturii interactiei electron-bozon.
- Sinteze ale compusilor organometalici prin metoda Nogoyama in pasi succesivi; c) Masuratori de spectroscopie optica (absorbție, fluorescența, infrarosu si Raman, dicroism circular magnetica) pentru confirmarea proprietatilor structurale si electronice ale compusilor; d) Masuratori de Rezonanta Nucleara Magnetica pentru evidentiarea structurii liganzilor si aranjarii acestora;
- Dezvoltarea unui formalism pentru descrierea tunelarii pe stari excitate si simularea masuratori de tip STM pe noi tipuri de nanostructuri, nestudiate pana acum in literatura. Tehnic, vor trebui mai intai calculate functiile de unda multi-particula, pentru diverse numere de ocupare, etapa care va fi realizata folosind metoda de inalta precizie Configuratie-Interactie. Suprapunerea spatiala a functiilor de unda corespunzatoare la numere consecutive de particule va da o simulare a semnalului STM. Structurile concrete pentru care dorim sa simulam asemenea masuratori sunt doturi cuantice din grafena, inele poligonale de tip miez/coaja (core-shell) si/sau diverse molecule. O interpretare corecta a imaginilor STM poate duce la intelegerea rolului (ponderii) corelatiilor in structura spectrala a diverselor sisteme, care de cele mai multe ori au fost descrise anterior doar in imaginea uni-particula.
- Studiul teoretic al regimului de transport tranzitoriu al nanomagnetilor moleculari in vederea identificarii efectelor specifice ale anizotropiei magnetice. Studiu teoretic al nanomagnetilor artificiali

sau moleculari plasati in vecinatatea unui nanorezonator. Identificarea si modelarea unor efecte optice netriviiale in doturi cuantice plasate in nanocavitati sau cuplate la moduri de vibratie.

- Studiu exhaustiv privind: i) proprietatile vibrationale ale materialelor compozite obtinute pe cale electrochimica in vederea stabilirii mecanismului de functionalizare a nanotuburilor de carbon cu politrifenilamina; in acest scop vor fi efectuate studii de spectroscopie SERS si FTIR; ii) evidentiarea proprietatilor fotoluminescente ale politrifenilaminei in absenta si respectiv in prezenta M-SWNTs si S-SWNTs si explicarea mecanismului de stingere a luminescentei pe baza diagramei nivelelor de energie ale constituentilor materialului compozit; iii) evidentiarea proprietatilor fotoluminescente anizotrope ale politrifenilaminei in absenta si respectiv in prezenta M-SWNTs si S-SWNTs.

- Caracterizarea heterostructurilor epitaxiale fara plumb folosind tehnici analitice avansate de microscopie electronica prin transmisie.

- Prepararea de GO, RGO si grafena prin metoda chimica, respectiv prin depunerea chimica din stare de vapori (CVD); 2. Sinteza precursorului de PPV. Obtinerea structurii multistrat de tip ITO/GO/PPV/(GO, RGO sau grafena CVD)/Al; 2. Determinarea pragului de percolatie a filmelor de PPV/GO, PPV/RGO si PPV/grafena CVD cu ajutorul masuratorilor de fotoconductie cuprins intre 0.01 % si 1 %. (material grafenic in procente de masa)

- Sinteza fizico-chimica si caracterizarea nanostructurale a nanofosforilor dopate cu pamanturi rare (ii) Caracterizarea proprietatilor luminescente si magnetice

- Stabilirea modului in care relatiile termodinamice si electrostatice in cazul feroelectricilor pot fi verificate prin masuratori electrice caracteristice. Elaborarea unor proceduri clare de analiza a rezultatelor experimentale; extragerea unor parametri intrinseci de material.

- Modelarea caracteristicilor curent-tensiune in cazul celulelor solare pe baza de perovskiti hibridi este foarte importanta pentru a identifica mecanismele responsabile cu degradarea acestora, cu aparitia histerezisului direct si invers, si cu cresterea eficientei de conversie a energie solare in energie electrica. Simularile teoretice pot sugera potentiale cai de eliminare a cauzelor degradarii si de imbunatatire eficientei de conversie.

- Grafena va fi depusa prin epitaxie in fascicul molecular pe straturi subtiri feroelectrice preparate astfel incat sa prezinte orientari opuse ale polarizarii orientate perpendicular pe stratul subtire [5]. Straturile obtinute vor fi caracterizate prin spectroscopie de fotoelectroni (XPS) de inalta rezolutie pentru estimarea stoichiometriei substratului si in special a vacanțelor de oxigen, precum si a cantitatii de carbon si a legaturilor pe care acesta le formeaza. Prin microscopie cu efect tunel (STM) se va estima calitatea grafenei depuse. Prin difractie de electroni lentii (LEED) se va analiza ordinea la distanta. Structura electronica cu rezolutie de spin va fi determinata prin spectroscopie de fotoelectroni din banda de valenta cu rezolutie de spin (SR-UPS). Bineinteles, se va analiza si posibilitatea existentei feroelectricitatii si in grafena nehidrogenata. Hidrogenarea se va realiza *in situ* folosind expunerea la hidrogen molecular cu proba in proximitatea unui filament care disociaza moleculele. Se vor realiza grade diferite de hidrogenare, iar pentru fiecare se vor relua determinarile XPS de inalta rezolutie, STM si SR-UPS (fara LEED, deoarece impactul electronic conduce la desorbția hidrogenului). Rezultatul va fi o corelatie a proprietatilor magnetice examinata din perspectiva asimetriei densitatii de stari cu rezolutie de spin cu structurile grafenelor si grafonelor, gradul de hidrogenare si orientarea polarizarii substratului.

Tema 2

Un prim obiectiv al temei il constituie proiectarea de materiale cu proprietati electronice bine definite, bazate pe utilizarea diverselor coduri de simulare simultan cu elaborarea de metodologii neconventionale avansate de caracterizare si preparare, prin care sa fie studiate si obtinute materiale cu proprietati dedicate diverselor aplicatii. Astfel, la ora actuala se manifesta un mare interes pentru studiul comportamentului magnetic si de spin in compusi Heusler, data fiind in special posibilitatea acestora de a poseda o polarizare totala de spin, cu implicatii directe asupra proprietatilor de magneto-conductie. In proiect vor fi supusi investigatiilor teoretice privind structura electronica si proprietatile asociate, noi compusi Heusler ternari si cuaternari susceptibili aplicatiilor spintronice si termoelectrice. Se va urmari obtinerea structurii electronice in cadrul teoriei Functionalei de Densitate si gasirea modalitatilor de modificare a acestora in vederea optimizarii proprietatilor dorite. In final luandu-se in considerare si o comparatie cu rezultatele experimentale. De asemenea, vor fi supusi investigarii comportamentului electronic si proprietatilor asociate, magnetice si optice, semiconductorii dopati cu cantitati mici de impuritati magnetice (Mn si Co) care sa le confere caracter de semiconductor diluat magnetic. Se va urmari

controlul proprietatilor magnetice si optice prin intermediul dopajului in vederea aplicatiilor de tip medii de prelucrare magneto-optica a informatiei si respectiv pentru aplicatii in optoelectronica. Observarea fenomenului de supraconductibilitate la temperaturi relative inalte pe stari de triplet de spin in compusi cu structuri cristalina non-centrosimetrice a deschis un domeniu de cercetare deosebit de activ in ultima decada, datorita interesului practic si acut in materialele supraconductoare. In acest sens, proiectul supune atentiei o investigatie teoretica asupra configuratiei electronice in compusi derivati din structura non-centrosimetrica a $\text{Li}_2(\text{Pt}, \text{Pd})_3\text{B}$. Din punct de vedere fundamental, studii recente au aratat ca efectul produs de cuplajul spin-orbita asupra trecerii de la starea de spin 0 la cea de spin 1 nu poate fi explicat numai pe baza schimbarii numarului atomic Z si a cresterii tariei cuplajului (de exemplu prin substitutia Pd prin Pt) si ca un rol important il are aparitia distorsiunilor locale ale retelei cristaline, acestea determinand o crestere a gradului de rupere a simetriei la inversie. Din punct de vedere fundamental, in timp ce opinia dominanta este ca supraconductia $\text{Li}_2\text{Pt}_3\text{B}$ este de tip s mediata de fononi, se vor cauta explicatii satisfacatoare privind natura si simetria benzii interzise, cu implicatii directe asupra comportamentului supraconductor al materialului. Se va urmări determinarea efectului substitutiei Pd prin Pt asupra configuratiei locale si schemei de realizare a legaturilor chimice in materialul bulk precum si determinarea efectelor datorate introducerii cuplajului spin-orbita si respective comparatia cu rezultate spectroscopice experimentale.

Se au in vedere investigatii teoretice si experimentale aprofundate vizand efectele interactiei dipolare si ale anizotropiei de forma asupra fenomenelor de relaxare magnetica in sisteme de nanoparticule dispersate. Se vor folosi algoritmi si programe dedicate de simulare micromagnetica a problemei energiei magnetice a sistemului de nanoparticule in diverse configuratii (densitati volumice de nanoparticule), atat in regim static cat si dinamic. Cu parametri magnetici referitori la energia de anizotropie si constanta de timp de relaxare obtinuti prin aceste metode se va aborda intr-un pas ulterior problema rezolvării ecuației transferului de caldura pe baza metodei elementelor finite implementata in pachetul COMSOL. Vor fi investigate urmarile efectelor interactiilor dipolare asupra raspunsului sistemelor de nanoparticule/nanofire magnetice in raport cu diverse aplicatii, propunandu-se modalitati de optimizare a comportamentului magnetic. Se vor efectua studii morfo-structurale si magnetice in sisteme de nanoparticule magnetice cu distributii de forma si dimensiuni. Se va urmări obtinerea de informatii exacte referitoare la forma si dimensiunea nanoparticulelor prin imagistica 3D precum si estimarea raportului dintre energia de anizotropie de forma vs. energia de anizotropie magneto-cristalina pe baza masuratorilor magnetice, a imagisticii 3D si a simularilor micromagnetice.

Vor fi Implementate in premiera pe plan national doua tehnici avansate de caracterizare morfostructurala a materialelor la nivel nanometric cu ajutorul microscopului electronic prin transmisie si anume (i) tomografia cu fascicul electronic si (ii) cartografia structurala cu fascicul electronic in precesie. 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 difracției 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.

Un al doilea obiectiv al temei, vizand sinteza si caracterizarea de noi nanosisteme cu dimensionalitate redusa, prin care sa fie induse functionalitati suplimentare specifice unor aplicatii bine precizate, va fi abordat din perspectiva urmatoarelor 2 clase de sisteme:

Sistemele 0D tip nanoparticule (NP) simple, cu structura core-shell dispersate sau in interactie.

Se vor investiga proprietatile si a mecanismele asociate nanostructurilor spinelice 0D obtinute prin diverse metode de sinteza si procesare ulterioara (in vederea formarii structurilor tip core-shell):

Se va aborda sinteza de nanoparticule din metale nobile cu proprietati catalitice, pe suprafete feroelectrice si caracterizarea lor complexa, inclusiv in raport cu chimismul specific acestora la modificarea starii de polarizare a substratului. sub actuatia de polarizare a substratului. Se va urmări obtinerea de probe feroelectrice cu suprafata curata, caracterizarea lor compozițională și din punct de vedere al stării de polarizare prin spectroscopie de fotoelectroni (XPS, UPS), caracterizarea structurale, prin difracție de electroni (LEED, RHEED), depunerea de metale nobile cu proprietăți catalitice, caracterizarea stării de încărcare prin XPS și UPS și studiul in situ al adsorbției și desorbției de molecule simple pe aceste suprafete, prin spectroscopie de fotoelectroni cuplată cu spectrometrie de masă.

Referitor la sistemele de nanoparticule magnetice (sisteme 0D) destinate aplicatiilor biomedicale (si in special celor de hipertermie magnetica), se are in vedere prepararea de nanoparticule magnetice (compusi oxidici, nitruri sau intermetalici) pe cale chimica care si care sa prezinte forma, dimensiuni si proprietati magnetice potrivite pentru hipertermia magnetica precum si caracterizarea complexa a acestora corelata cu proprietatile de hipertermie magnetica. Astfel, nanoparticulele magnetice vor fi preparate prin metode chimice in solutie pentru obtinerea precursorilor urmate de tratamente in flux de gaz (argon, hidrogen, azot, amoniac) in vederea stabilizarii fazelor de inertsi (magnetita, ferite, Fe-N sau compusi intermetalici). Sistemele vor fi caracterizate compozitional si structural (forma, dimensiuni) prin TEM, SEM/EDAX, difractie de raze X, FTIR si respectiv magnetic prin spectroscopie Mossbauer si masuratori magnetice utilizand VSM si SQUID. Se vor corela informatiile obtinute din caracterizarea compozitionala, structurala si magnetica in vederea imbunatatirii efectului de hipertermie magnetica si se vor dezvolta sistematici de evaluare a parametrilor importanti in hipertermia magnetica si proceduri originale de evaluare a ratei specific de absorbtie (SAR). Se estimeaza ca prin ajustarea formei si a compozitiei nanoparticulelor (ferite, compusi intermetalici, nitruri) sa se realizeze nanofluide cu valoare SAR ridicata, iar nanoparticulele sa aiba dimensiuni mai mici decat cele din nanofluidele pe baza de magnetita fapt care permite o mult mai buna infiltrare in structura tumorilor si distrugerea lor prin hipertermie magnetica.

S-a constatat ca modificarea proprietatilor magnetice si adaosul de noi functionalitati in sisteme de nanoparticule se poate atinge inclusiv prin formarea de structuri core-shell (in care cel putin o componenta sa fie magnetica). In acest sens se intentioneaza obtinerea unor astfel de structuri in nanoparticule de Fe/oxid de Fe obtinute prin piroliza laser, supuse unor tratamente termice in atmosfera de hidrogen (urmarindu-se reducerea controlata a starii de oxidare a Fe dinspre suprafata inspre volum. Se va urmări determinarea compoziției de faze și legătura cu proprietățile magnetice precum si influenței tratamentelor de hidrogenare asupra structurii locale și proprietăților magnetice ale sistemelor 0D cu structura core-shell.

Studiul multifunctionalitatii induse la interfata feroelectric/feromagnet va fi extins si la cazul sistemelor 0D cu structura core-shell. Se propune prepararea si caracterizarea unor compozite core-shell formate din BNT-BT0.08 și CoFe₂O₄, in proportii masice variabile. Aceste compozite combina proprietățile piezoelectrice ale BNT-BT0.08 cu proprietatile magnetice ale CoFe₂O₄. Metoda de sinteza care va fi folosita pentru prepararea celor doua faze va fi metoda sol-gel. Structurile obtinute vor fi caracterizate din punct de vedere structural, morfologic, feroelectric si feromagnetic in vederea testarii multifunctionalitatii lor. Importanta acestor studii rezida din aplicatiile acestor compozite care pot fi folosite in dispozitive precum condensatoarele, senzorii piezoelectrice, dispozitivele magnetoelectronice, senzorii de câmp magnetic, etc.

Referitor la studiul sistemelor 0D de tip DMO, se are in vedere investigarea proprietatilor magnetice ale nanoparticulelor de ZnO in scopul evidentierii rolului dopajului asupra proprietatilor magnetice ale compusului. Pe de alta parte, prin procesari de non-echilibru se vor crea conditii extreme locale rezultand in formarea rapida a diverselor nanocristale de de oxizi. Conditiiile extreme presupun controlul a o serie de factori: tipul precursorilor initiali, concentratia solutiei initiale, viteza de reactie, presiunea partiala de oxigen, prezenta vaporilor de cationici la suprafata precursorului, temperatura, etc. Prin aceste procedee starile excitate (defectele) vor fi "inghetate" in numar cat mai mare in reseaua oxidului. Masuratorile magnetice, fotoluminiscenta, EPR, XPS, SEM/TEM/EDX, FTIR, etc. vor fi folosite pentru a analiza particularitatile starilor de excitare si ale defectelor corespunzatoare.

Se vor investiga efectele induse de campuri magnetice variabile si statice asupra eficientei unor reactii fotocatalitice desfasurate pe suprafata nanoparticulelor de TiO₂. Se va urmări identificarea contributiilor generate/mediate de proprietati magnetice ale materialului, iradierea UV, sarcina superficiala a nanoparticulelor de TiO₂ si prezenta speciilor reactive de oxigen in mediul de reactie studiindu-se in mod amanuntit eficienta reactiilor fotocatalitice in prezenta campurilor magnetice variabile/statice.

Sistemele 2D Tip filme subtiri sau multistraturi (simple si cuplate).

Avand la dispozitie o infrastructura diversificata pentru depuneri de straturi subtiri si multistraturi (PLD, pulverizare RF/DC, MBE, diverse metode chimice, MAPLE, CVD, etc.), precum si o inelungata expertiza a personalului implicat in proiect, se propune o abordare complexa a sistemelor 2D (filme subtiri si multistraturi cuplate), atat in raport cu fenomenele fizice fundamentale implicate, cat si cu posibilele aplicatii de inalt interes ale acestora. O atentie speciala va fi acordata semiconductorilor cu banda larga (oxizi metalici simpli, nitruri), diverselor tipuri de electrozi, filmelor oxidice, organometalice

si grafenei, precum si filmelor feroelectrice si magnetice, intre care combinatiile feroelectric/feromagnet, feromagnet/supraconductor joaca un rol insemnat. Printre aplicatiile avute in vedere sunt: diferite tipuri de senzori, noi arhitecturi de tranzistor cu efect de camp pentru aplicatii in electronica, noi tipuri de memorii nevolatile cu stari multiple (ex. de tip memristor), noi arhitecturi de celule fotovoltaice, materiale pentru super-capacitori, etc.

Tot in directia materialelor pentru dispozitive opto(electronice) se propune dezvoltarea de aliaje de tipul $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{N}$, obtinute sub forma de filme subtiri prin pulverizare cu magnetron. Straturile subtiri astfel obtinute vor fi caracterizate din punct de vedere structural (XRD), optic (SE) si al proprietatilor electrice (caracteristici I-V). Totodata, se vor face investigatii preliminare in vederea realizarii de senzori si dispozitive (opto)electronice pe baza acestor filme.

Vor fi preparate filme subtiri cu proprietati magnetostriptive pe substrat flexibil urmarindu-se evolutia configuratiei magnetice la deformarea substratului si influenta acesteia asupra efectelor de magneto-conductie. Se vor efectua investigatii complexe magnetice, de transport si morfo-structurale, in vederea optimizarii functionalitatii de senzor de deformare (fenomene similare vor fi studiate in cazul benzilor intermetalice magnetos-trictive). Se vor propune noi metodologii de estimare a coeficientilor de magneto-strictiune.

O atentie deosebita va fi acordata studiului filmelor feroelectrice, simple si in arhitecturi complexe. Se vor obtine filme epitaxiale de oxizi feroelectrici de tip perovskit PZT, BTO, pe diferite substraturi ca de exemplu SRO/STO, LSMO/STO, STO, STON, si se va studia structura de domenii prin tehnici de difractie de raze X de inalta rezolutie-inclusiv microdifractie si figuri de poli, microscopie de forta piezo si microscopie de inalta rezolutie.

Proprietățile dependente de compoziție, de dimensiune și formă sunt de interes pentru cercetarea fundamentală în feroelectrici inducând efecte intrinseci, în timp ce granițele, interfețele și defectele influențează prin efecte extrinseci. Cu toate acestea, indiferent de tipul de heterogenitate dintr-un material feroelectric (defecte structurale, substituții, vacanțe ionizate, specii polare), toate interacțiunile sunt influențate de creșterea temperaturii.

Rezultatele obtinute folosind spectroscopia de impedanta pe materiale feroelectrice masive (3D) sau straturi subtiri (2D) vor ajuta la înțelegerea modului în care rivalitatea dintre speciile încărcate și fazele feroelectrică/paraelectrică ale materialului afectează proprietățile funcționale ale feroelectricilor cu punctul Curie sub și peste temperatura camerei. Completând cunoștințele privind efectul variațiilor de temperatură asupra proprietăților funcționale pentru această clasă de perovskiți, în funcție starea lor feroelectrică/paraelectrică în apropierea temperaturii camerei, se poate înțelege originea mecanismelor de conducție și de relaxare dielectrică activate termic în feroelectrici.

Filme feroelectrice fara plumb de calitate epitaxiala vor fi realizate pe diferite substraturi prin ablatie laser. Se va urmări un studiu fundamental, ce vizează deslusirea fenomenelor si mecanismelor care au loc la nivel atomic care stau la baza controlului unor parametri de material ce influenteaza proprietatile macroscopice (temperatura Curie, constanta dielectrica, polarizare). Se vor avea in vedere urmatoarele abordari: optimizarea parametrilor de depunere in scopul de a obtine filme subtiri de inalta calitate pe diferite substraturi monocristaline, studiul dependentei proprietatilor la nivel atomic functie de constanta de retea a substratului si analiza efectelor de strain indus de diferenta de constanta de retea dintre substat si materialul feroelectric. Caracterizarea heterostructurilor epitaxiale fara plumb se va efectua folosind tehnici analitice avansate de microscopie electronica prin transmisie. Se vor efectua studii structurale folosind difractia de electroni si microscopia electronica prin transmisie conventionala si de inalta rezolutie. Se vor analiza interfetele intre straturi folosind EELS-SI la rezolutie atomica si se vor studia defectele extinse prezente.

Se va urmări sinteza și caracterizarea complexa, în raport cu proprietatile structurale, magnetice și fotocatalitice, a filmelor subtiri de WO_3 cu vacante de W ajustabile. Sinteza filmelor se va face în incinta MBE, iar caracterizarea acestora se va realiza prin difracție și spectroscopie de fotoelectroni, difracție de raze X și microscopie electronică de baleiaj (SEM). Se vor analiza proprietățile fotocatalitice (degradarea MB) și magnetice (prin MOKE, SQUID) în functie de caracteristicile vacantelor de W.

În privința filmelor supraconductoare se va urmări atât fabricarea de straturi subtiri din supraconductori cu T_c ridicata (prin ablatie laser) folosind decorarea substratului cu nano-insule, arhitectura multistrat si quasi-multistrat, tinte cu nanoincluziuni de faza secundare si combinatii ale acestora precum si caracterizarea proprietatilor supraconductoare in functie de intensitatea si orientarea campului magnetic aplicat, temperatura, si arhitectura nano-compozitului. Se vor determina materialele si arhitecturile

optime pentru imbunatatirea capabilitatii de transport fara pierderi a curentului electric in campuri magnetice intense si vor fi aduse noi contributii la studiul dinamicii si fixarii vortexurilor in sisteme 2D supraconductoare. De asemenea, se va urmari fabricarea de materiale supraconductoare nanostructurate hibride de tipul supraconductor-feromagnet. Vor fi abordate urmatoarele arhitecturi: straturi supraconductoare cu nano-incluziuni de material feromagnetic; nanostructuri multistrat sau quasi-multistrat (strat incomplet de feromagnet); si straturi supraconductoare „decorate” cu insule nanometrice si/sau (sub)micronice de diverse forme si dimensiuni urmarindu-se determinarea influentei materialului feromagnetic asupra proprietatilor supraconductoare ale sistemelor (de exemplu se va evalua eficienta nanoparticulelor si/sau nanostraturilor feromagnetice ca centri pinning).

Al treilea obiectiv al temei se refera la sinteza si caracterizarea de materiale nanocompozite diverse. Contributia stiintifica si tehnica se refera in acest context la identificarea parametrilor de sinteza si optimizarea acestora intr-un proces de tip feed-back, pornind de la rezultatele experimentale obtinute prin diverse tehnici avansate de caracterizare fizico-chimica. In cazul materialelor autoreparabile, contributia stiintifica si tehnica are in vedere intelegerea proceselor fizico-chimice de autoreparare in sistemele abordate. O atentie speciala va fi acordata monitorizarii prin metode optice a proceselor de functionalizare si defunctionalizare a nanotuburilor de carbon cu un singur perete (SWNTs) cu polifurfuril metacrilat (PFMA) prin reactiile Diels-Alder (DA) si respectiv retro-Diels-Alder (rDA). Elementul de noutate al studiului il constituie ilustrarea comportamentului SWNTs metalice si, respectiv, semiconductoare in reactiile DA si rDA.

In privinta nanocompozitelor eficiente in descompunerea apei, ne propunem sinteza si folosirea structurii hematita-bioxid de titan ca fotoanod cu banda larga de absorbtie a fotonilor din spectrul vizibil si UV, date fiind benzile de absorbtie potrivite ale celor doi semiconductori oxidici. In plus, interfetele heterogene hematita-bioxid de titan pot crea campuri electrice puternice care vor diminua procesele de recombinare a perechilor electron-gol fotogenerate.

Filmele cu NC de Ge imersate in matrici dielectrice vor fi depuse prin pulverizare catodica cu magnetron. Urmarii ajustarea conditiilor tehnologice astfel incat nanostructurarea filmelor sa se realizeze la temperaturi mai scazute pentru evitarea contaminarii prin transfer tehnologic si/sau prin tratamente RTA. Probele vor fi caracterizate din punct de vedere al proprietatilor optice, iar rezultatelor vor fi corelate cu morfologia, structura filmelor (TEM, XRD, XPS) si conditiile de obtinere. Se vor studia structuri pe baza de NC de Ge imersate in matrici dielectrice, precum SiO₂, Al₂O₃ sau Si₃N₄. Proprietatile optice si (foto)electrice ale filmelor cu NC vor fi modelate folosind diferite modele, pornind de la cunoasterea morfologiei si structurii, in scopul obtinerii unor caracteristici optime. Rezultatele vor fi comparate cu experimentul, urmarind o sensibilitate crescuta a filmelor in diferite domenii spectrale pentru aplicatii optoelectronice. De asemenea, se vor prepara filme si structuri multistrat din sistemul SiGeSn folosind metoda pulverizarii cu magnetron urmata de tratament RTA pentru nanostructurare. Morfologia nanostructurilor va fi variata prin modificarea parametrilor de depunere (modificarea compozitiei) si a conditiilor de tratament termic (dimensiuni si densitate NC, distanta de separare dintre NC). Proprietatile electrice ale nanostructurilor vor fi investigate prin masurari de caracteristici curent-tensiune si curent-temperatura, urmate de modelarea acestora pe baza rezultatelor de morfologie si structura pentru determinarea mecanismelor de transport. Toate acestea servesc la obtinerea de nanostructuri din sistemul SiGeSn cu proprietati electrice de interes pentru aplicatii. In privinta compozitelor lichide ionice-nanoparticule, contributia stiintifica si tehnica este motivata de dobandirea de noi cunostinte despre noi tipuri de materiale compozite pe baza de sisteme moleculare anizotrope-nanoparticule. Elementele de noutate ale demersului nostru se bazeaza pe folosirea unui program experimental complex prin care se studiaza proprietatile electrice sub influenta a trei marimi: frecventa, temperatura si tensiunea de polarizare. Folosirea unor functii model permite obtinerea unor parametrii specifici dinamicii moleculare: frecventa caracteristica de relaxare, energia de activare, etc. Va fi elaborat un program complex de caracterizare a proprietatilor electrice prin spectroscopie dielectrica pentru determinarea parametrilor electrici in functie de frecventa, temperatura si tensiunea de polarizare, urmand a se stabili corelatia dintre conditiile de preparare a materialului (concentratia de dopare) si proprietatile electrice.

In privinta compusilor de tip Heusler nanostructurati, ne propunem ajustarea stoichiometriei aliajelor prin substitutii de Co si Gd, pentru realizarea cuplajului magneto-structural si obtinerea unui efect magnetorezistiv si magnetocaloric in camp magnetic moderat. Totodata, urmarim stabilizarea austenitei ordonate magnetic, cresterea mobilitatii twin-urilor martensitei si adaptarea intervalului de temperatura de lucru la cele mai potrivite aplicatii prin asocierea dintre compozitii si tratamente termice diferite. Se

propune obtinerea de benzi pe baza de Fe-Mn-Ga prin variatii compositionale, a parametrilor caracteristici metodei de preparare „melt-spinning” si a tratamentelor termice. Se va studia efectul acestora asupra proprietatilor structurale, magnetice, magneto-elastice si de transport, urmarindu-se stabilirea parametrilor caracteristici si a compozitiilor optime pentru obtinerea unor materiale cu potential in aplicatii.

Tema 3

Contributia stiintifica implica mai multe arii de activitate. In ceea ce priveste hidroxiapatita, contributia consta in elaborarea de solutii pe baza de AgHAp ce pot fi utilizate ca si tratament in cazul plagilor cutanate acute, cu scopul de a creste indicele de calitate al vietii si de a reduce morbiditatea prin producerea si utilizarea biomaterialelor bazate pe hidroxiapatita dopata cu argint. Se vor evidentia si demonstra contributiile majore care ar putea fi aduse de catre straturile subtiri de ZnHAp in reducerea incidentei infectiilor asociate implanturilor. Proiectul ofera o tematica de cercetare integrata intercomparativa asupra straturilor subtiri de bioceramice de hidroxiapatita dopata cu zinc utilizate in aplicatii medicale cu scopul de a inhiba sau preveni infectii asociate implanturilor. Realizarea obiectivelor propuse in cadrul proiectului vor aduce o contributie majora in utilizarea clinica a implanturilor si vor contribui considerabil la cresterea calitatii vietii prin prevenirea infectiilor asociate implanturilor.

Miniaturizarea efectului magnetic de memorie a formei prin realizarea de materiale sub forma de benzi si imbunatatire proprietatilor magneto si termo-elastice prin substitutii cu elemente biocompatibile (Ti) permit realizarea de biodispozitive medicale (stenturi, filtre de vena cava) controlabile magnetic

Contributia stiintifica va contribui si la dezvoltarea domeniului materialelor piezoceramice prin obtinerea unor compozitii noi de materiale piezoelectrice „dure” cu proprietati controlate ce vor fi folosite pentru aplicatii in domeniul sanatatii. Pentru prepararea pulberilor ceramice vom folosi ca dopanti elemente chimice de tip „acceptor” cum ar fi Fe, Mn, Sb, Ce, etc. Se vor urmari obtinerea de probe cu valori mari ale factorului de cuplaj, ale constantei dielectrice si ale factorului de calitate mecanic dar si cu pierderi reduse. Pornind de la materiile prime vom obtine cu ajutorul tehnologiei ceramice elemente piezoelectrice active ce vor fi caracterizate din punct de vedere morfostructural, dielectric si piezoelectric cu ajutorul echipamentelor existente in INCDFM.

In ceea ce priveste utilizarea nanoparticulelor de oxid de fier se propune realizarea unor noi materiale care pot fi directionate sub influenta unui camp magnetic exterior in interiorul celulelor tumorale contribuind astfel la dezvoltarea de noi terapii oncologice noninvazive. Aceste noi materiale prezinta potentialul de a fi tehnologii revolutionare in domeniul diagnosticului si tratamentului neoplasmelor.

Contributia stiintifica majora in domeniul nanoparticulelor de germanat de bismut functionalizate este legata de controlul dimensionalitatii particulelor de germanat de bismut pentru procese de drug delivery, dar si de functionalizarea acestora printr-un procedeu de activare colalenta. Activarea covalenta a BGO cu grupari carboxilice pe suprafata prin intermediul celor doi activatori 1-(3-Dimetilaminopropil)-3-etilcarbodiimida (EDC) si N-hidroxisuccinimida (NHS) a fost adaptata din chimia peptidelor. Aceasta reactie se bazeaza pe activarea gruparilor carboxilice cu formare de ester. Astfel nanoparticulele de BGO activate cu EDC prin formarea unui intermediar O-acil-izouree. Rolul NHS este de a creste eficienta cuplarii prin stabilizare si de a facilita legarea compusilor.

Stresul oxidativ are ca principala cauza afectarea componentele celulare, inclusiv a proteinelor. Leziunile oxidative in proteine pot aparea la nivelul aminoacizilor dar si a lantului peptidic cu formarea de grupari carbonil. Astfel, cuantificarea gruparilor carbonil este necesara pentru determinarea gradului de lezionare al proteinelor. Cu referire stricta la BSA, in contextul acestei teme de cercetare, integritatea proteinei pentru dezvoltarea de sisteme de detectare tumorala este esentiala. Se are in vedere utilizarea/dezvoltarea de senzori electrochimici cu molecule ligand cu terminatii amino pentru recunoaste gruparilor carbonil in BSA pentru cuantificarea gradului de oxidare a acesteia.

Problema evaluarii corecte a stabilitatii unui implant dentar ar putea servi ca baza pt. brevetarea unui dispozitiv acustic de caracterizare rapida a stabilitatii implantului, eventual prin implementarea unei aplicatii pe telefonul mobil al medicului.

Valorificarea membranelor fibroase proteice ce pot fi recoltate din coji de ou (considerate deseuri) sub forma de materiale hibride de tip membrane proteine acoperite cu nanostructuri de ZnO prin depunere auto-catalitica.

Principala contribuție științifică în domeniul depunerii de filme de ARN și ADN se referă la investigarea proprietăților de transport a purtătorilor de sarcină prin heterostructurile pe bază de straturi subțiri din bazele acizilor nucleici și investigarea efectului iluminării asupra comportării heterostructurii.

Tema 4

Contribuțiile sunt prezentate pe domeniile principale avute în vedere din punct de vedere al aplicațiilor
A. Energie-Mediu:

Celule solare cu semiconductori tradiționali-Se vor depune filme cu diferite compoziții și detalii structurale/microstructurale care vor fi caracterizate complex pentru înțelegerea relațiilor dintre procesare, material și proprietățile funcționale ale celulei solare.

Se urmărește abordarea unor structuri fotovoltaice în configurație de diodă Schottky, pe bază de straturi de nanocristale de GaAs și CdTe. Aceste structuri vor consta din straturi de nanocristale între două pelicule conductoare - una transparentă (ITO/sticlă) și una pentru contact ohmic (depunere metalică). Activitățile de cercetare implică o succesiune de operații de obținere și caracterizare specifice. Astfel în obținerea de straturi de nanocristale vor fi vizate trei direcții de abordare:

- Obținerea de straturi de NC prin metode chimice, din precursori.

Spre exemplu nanocristale de GaAs se vor obține din reacții între halogenuri de Ga ca precursori pentru Ga și $(\text{Na/K})_3\text{As}$ ca și precursori pentru As; solvenții folosiți vor fi toluen, dimetil glicol (monoglyme), diglyme. Influența solvenților asupra dimensiunilor cristalelor va fi investigată, la fel și influența tratamentelor de spin-coating și a tratamentelor termice ulterioare. Nanocristale de CdTe pot fi obținute prin reacții ale $\text{Cd}(\text{OH})_2$ cu soluții alcaline de Te.

- Obținerea de straturi de nanocristale prin metode electrochimice

Depunerea electrochimică de nanocristale de compuși semiconductori prezintă unele avantaje față de cele chimice: distanțele între nanocristale sunt mai reduse, grosimea stratului poate fi mai ușor controlată, interfața cu stratul conductor depus este mai intimă și mai lipsită de impurități.

Obținerea de NC de GaAs se poate face prin depunerea electrochimică pe substrat de ITO/sticlă din soluție de Ga și As_2O_3 în HCl. Alte căi pot fi de asemenea urmate. Obținerea de NC de CdTe se poate face folosind soluții acide de $\text{Cd}(\text{SO}_4)_2$ și TeO_2 , pe un substrat de ITO/sticlă ca și electrod.

În cazul depunerii electrochimice, densitatea curentului, timpul de depunere, temperatura și dozajul soluțiilor joacă rolul decisiv în stabilirea unor proprietăți ale straturilor de NC: grosimea filmului, stoichiometria NC, dimensiunile și forma NC, absorbția optică. Corelarea efectelor acestora va fi studiată prin caracterizări morfologice și de compoziție ale straturilor obținute.

Caracterizarea straturilor depuse va fi făcută prin metode de determinare a compoziției chimice-XPS, ARXPS precum și prin metode de determinare a morfologiei de suprafață-STM, AFM SEM și TEM.

Următorul pas va fi obținerea de structuri funcționale de tip *metal/strat NC/(ITO/sticlă)* și caracterizarea lor electro-optică. Parametrii structurilor - înălțimea barierei, rezistența serie, eficiența, curentul de întineric, vor fi determinate. Vor fi studiate de asemenea interfețe de tip *metal/strat NC* și influența fenomenelor de interfață asupra parametrilor celulelor solare. Pe baza investigațiilor straturilor de NC obținute vor fi abordate o serie de probleme specifice acestui domeniu. Una din principalele cerințe este ca nanocristalele să fie cuplate electric foarte bine, astfel încât mobilitatea purtătorilor să fie ridicată. Prin urmare studiul morfologiei straturilor va fi esențial pentru determinarea unor condiții optime de obținere de straturi foarte compacte și cu dimensiunea NC dorită. Eliminarea impurităților chimice și pasivarea suprafeței va produce o densitate scăzută de capcane responsabile pentru o rată crescută de recombinare a purtătorilor. De altfel, existența unei densități mari de centri de recombinare reduce până în prezent eficiența unor astfel de dispozitive, structurile obținute până în momentul de față având mobilități ale purtătorilor cu aproape 3 ordine de mărime mai mici decât cele așteptate[negr3]. Încă nu există un model și un mecanism de transport al purtătorilor într-o astfel de structură, iar anumite operațiuni - precum tratamentele termice, pot avea efecte contradictorii. Corelarea măsurătorilor electrice cu cele de morfologie vor aduce îmbunătățiri însemnate în tratarea acestor aspecte.

Celule solare cu semiconductori organici-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. Aceasta presupune un studiu al materialelor de tip bariera compatibile cu perovskitul hibrid, inerte astfel încât să nu inducă deteriorări ale perovskitului cât și procedee alternative de încapsulare.

Ca activități propuse, 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. 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 $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$ 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 $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_{3-x}\text{Cl}_x$ va fi studiată în cadrul acestui proiect. Se va efectua studiul sistematic al condițiilor de încapsulare a stratului perovskitic, prin varierea diferiților parametri de sinteză: concentrație, temperatură, solvent, raportul dintre reactanți, adăugarea de surfactanți; De asemenea, va urma caracterizarea straturilor încapsulate prin diferite tehnici: TG-DTA, XRD, XPS, UV-VIS, proprietăți fotovoltaice și, în special, determinarea stabilității termice a stratului perovskitic încapsulat.

În ceea ce privește *celule solare organice* principală contribuție științifică se referă la obținerea din soluție prin spin coating și la studiul proprietăților morfologice, optice și electrice ale unor straturi mixte continuând donori pe baza de carbazol și acceptori derivați ai fullerenei, pentru aplicații în conversia energiei solare. Alte contribuții semnificative:

Sinteza și caracterizarea compusilor organometalici sub formă de pulberi sau filme subțiri

2. Funcționalizarea stratului acceptor pe baza de carbon pentru o mai bună aliniere a benzii și legarea cu compusi organometalici.

3. Măsurarea lungimii de difuzie a excitonilor în ambele configurații

4. Măsurători de fotocurent pentru evaluarea parametrilor principali ale dispozitivelor fotovoltaice obținute.

În ceea ce privește celulele solare hibride, principală contribuție științifică se referă la realizarea prin MAPLE a unor structuri hibride organic/anorganic pe baza de compusi organici cu molecula mică și folosind nanoparticule anorganice, pentru aplicații în conversia energiei solare.

Water splitting-Cele mai performante materiale care vor conține Ni depus pe un suport oxidic, caracterizate electrochimic, vor fi incluse în modelul experimental. Realizarea anodului și fixarea acestuia pe membrana de electrolit se va executa prin presarea pulberilor catalitice împreună cu un liant special pentru asigurarea rezistenței mecanice și a porozității optime. Se va încerca și presarea directă pe membrană, la temperaturi joase, pentru a nu se afecta proprietățile membranei de electrolit.

Costul real al tehnicilor și al materialelor utilizate în prepararea materialelor, care vor fi folosite în acest proiect, dar și natura ecologică a procedurii hidrotermale implicate în sinteza suportului, fac ca această procedură să fie potrivită pentru aplicații practice.

Având în vedere aceste rezultate, pasul următor îl va reprezenta optimizarea raportului dintre componentele sistemului fotocatalitic format din NiO , ZnO și TiO_2 Evonik P25. În acest scop, se vor avea în vedere două direcții de cercetare: (i) Optimizarea raportului dintre componentele sistemului fotocatalitic astfel încât randamentul reacției fotoelectrocatalitice a apei să fie cât mai mare la un cost total cât mai mic posibil; (ii) Caracterizarea complexă structurală, morfo-chimică și funcțională a fotocatalizatorilor obținuți.

O altă activitate presupune realizarea de celule fotoelectrochimice pentru descompunerea apei. Se vor fabrica celule fotoelectrochimice bazate pe fotoanozi ce conțin semiconductorul nemetalic $\text{g-C}_3\text{N}_4$ (graphitic carbon nitride) și catozi din metal nobil care să permită descompunerea apei folosind energia solară. Se vor face studii electro-optice pentru a investiga performanța celulelor. Se va prepara semiconductorul $\text{g-C}_3\text{N}_4$ atât ca pudră, cât și ca film și se vor produce fotoanozi ce conțin fie $\text{g-C}_3\text{N}_4$, fie structuri hematită/ TiO_2 / $\text{g-C}_3\text{N}_4$. Celulele fotoelectrochimice obținute vor fi folosite la descompunerea fotoelectrochimică a apei.

Baterii-Prin prepararea straturilor subțiri de cristale ionice și studiul la scala nanometrică a proceselor asociate conductiei ionice și a interacțiunii la interfața cu suprafața metalică se urmărește crearea de sisteme model pentru realizarea și îmbunătățirea bateriilor solide. Principalele rezultate vor fi sinteza filmelor subțiri de cristale ionice model (NaCl , AgI) depuse pe suprafața electrodului metalic (monocristal de Cu , Ag) în condiții de vid ultra înalt și studiul de suprafață la nivel nanometric, în

principal prin microscopie de efect tunel (STM) și prin spectroscopie de fotoelectroni (XPS) a structurii, defectelor și proceselor asociate conducției ionice.

Stocarea hidrogenului- Se urmărește sintetizarea de amestecuri de hidruri, borohidruri sau amiduri prin metode mecano-chimice sau fizico-chimice (impregnarea din soluție în suporti nanoporoși) catalizate cu nanoparticule oxidice sau metalice dispersate pe suporti care prezintă absorbție/desorbție eficientă a hidrogenului, precum și caracterizarea complexă a acestora corelată cu proprietățile stocatoare de hidrogen. Se vor prepara catalizatori pe bază de oxizi (ferite, magnetită) sau nanoparticule metalice dispersate pe suporti nanoporoși, precum și compozite (hidruri, borohidruri sau amiduri) dispersate pe suport nanoporos simplu sau catalizat prin măcinare în moara cu bile sau prin impregnarea din soluție a hidrurilor în porii suportilor nanoporoși catalizați. Va urma caracterizarea compozițională și structurală prin TEM, SEM/EDAX, difracție de raze X, FTIR a acestor materiale precum și investigarea proprietăților de absorbție/ desorbție de hidrogen prin metoda volumetrică (Sievert). În final, se va efectua corelarea informațiilor obținute din caracterizarea compozițională, structurală și a proprietăților stocatoare în vederea îmbunătățirii proprietăților cinetice și termodinamice de stocare de hidrogen.

Tratament reziduuri-Studiile privind biomineralizarea metalelor grele folosind cianobacterii sau foraminifere bentonice vor aduce informații noi privind modul în care sunt transformate metalele grele de către organismele unicelulare. Folosind tehnicile de microscopie electronica disponibile, vor fi identificate gradul de mineralizare al unor metale (Zn, As, Ca, Co etc.) și structura lor cristalină.

B. TIC, Spațiu-Securitate:

Fotodetectori-Piroelectrici: Scopul este de a crește nivelul cercetării orientate către dezvoltarea de aplicații în domeniul detecției radiației IR (electronica, optoelectronica, spațiu și securitate, senzorială), care sunt bazate pe materiale fără plumb. Infrastructura și expertiza INCDFM pentru realizarea de straturi subțiri și multistraturi permit combinarea materialelor sub formă de straturi subțiri în diverse geometrii, care să conducă la caracteristici superioare ale structurilor din punct de vedere al răspunsului piroelectric.

Elemente de noutate:

- Metodele de optimizare ale proprietăților piroelectrice sunt inovatoare și duc la creșterea sensibilității dispozitivelor utilizate în domeniul detecției radiației IR [3] [4][7][8]
- Relația dintre răspunsul piroelectric și proprietățile structurale și feroelectrice pe filme subțiri fără plumb este foarte puțin abordată la nivel național și internațional
- O atenție deosebită va fi acordată relației dintre proprietățile piroelectrice și curentul de scurgere, având în vedere că un control al acestuia prin legătura cu stresul generat în structură sau interfețe, pe materiale feroelectrice fără plumb, nu a fost încă abordat în literatură
- Interfața metal-feroelectric este de asemenea un subiect puțin dezvoltat, iar pentru un studiu riguros al acesteia, filmele trebuie să fie de foarte bună calitate (epitaxiale); tehnologia actuală permite obținerea acestora.

Se vor face măsurători de semnal piroelectric, în modul de lucru tensiune, ale structurilor bazate pe feroelectrice fără plumb, cu scopul de a fi folosite ca elemente active în detectori piroelectrice.

În cazul acestor tipuri de structuri, se vor urmări:

- corelarea proprietăților structurale, electrice și piroelectrice;
- înțelegerea influenței curentilor de scurgere și a pierderilor prin conducție asupra semnalului piroelectric, prin optimizarea interfețelor și a contactelor metalice utilizate;
- stabilirea rolului contribuțiilor extrinseci la semnalul piroelectric, de exemplu a celor piezoelectrice, generate de stress sau de încălzirea neuniformă a structurii.

Semiconductori pentru fotodetectori- Se vor obține noi cunoștințe și de a dezvolta noi aplicații în domenii de interes ridicat cum ar fi industriile de înaltă tehnologie (securitate, auto). Un accent aparte va fi pus pe durabilitate în exploatare, cost redus, flexibilitate, abundența naturală a elementelor constitutive și amprenta redusă asupra mediului înconjurător. Printre aplicațiile avute în vedere sunt: elemente optice pentru sistemele de imagistică termică (vedere pe timp de noapte a amprentei termice a obiectelor, fiintelor) utilizate în misiunile armatei, jandarmeriei și industria auto. Elementele de noutate constau în folosirea unei noi metode de preparare (aliere mecanică + Spark Plasma Sintering – SPS) a sticlelor calcogenice și a unei compoziții calcogenice noi.

Senzori gaze- Se va iniția dezvoltarea modelului teoretic de conducție pentru filme compacte de oxizi metalici semiconductori cu aplicații în detecția de gaze. Principalul scop al proiectului este formularea dependenței conductanței de grosimea filmului gaz senzitiv; cazurile particulare ale semiconductoarelor

de tip n si p în aproximatia Maxwell-Boltzmann. Se va estima evoluția conductanței normalizate în funcție de: (i) lungimea Debye; (ii) grosimea filmului gaz senzitiv; (iii) curbarea de suprafață a benzilor energetice; (iv) temperatura de operare a filmului gaz senzitiv. Un alt obiectiv al activității legate de senzorii de gaze este elaborarea de soluții aplicative pentru îmbunătățirea selectivității senzorilor chemorezistivi prin folosirea unui sistem binar de materiale oxidice semiconductoare, $(1 - x) \text{SnO}_2 - x \text{NiO}$. Se va evalua specificitatea morfologică indusă de parametrii de sinteză hidrotermală și se va efectua validarea în laborator a funcționalității sistemului prin simularea condițiilor atmosferice și a noxelor potențial prezente în teren. De asemenea, se va realiza un material nanocompozit pe bază de calcogen și porfirine hidrofoabe pentru senzori de gaze toxice sau explozive. Acest nou material va fi realizat sub forma de strat subțire și va fi sensibil la gaze specifice și în prezența vaporilor de apă. Materialul va fi caracterizat din punct de vedere structural (XRD), al topografiei suprafeței (SEM), se va determina structura compozițională a interfeței de contact a stratului subțire cu gazele de test (XPS), precum și răspunsul rezistiv la gaze cu și fără prezența vaporilor de apă.

Microunde-Antene- Se vor propune geometrii noi de structuri care pot fi folosite ca dispozitive de tip atenuator respectiv defazor în unde milimetrice și THz. Deoarece aparatura de THz permite obținerea unor semnale de frecvențe practic până la 7 THz, un interes deosebit va fi obținerea de structuri de tip strat subțire depus pe substrat transparent în THz pentru procesarea adecvată a semnalului la frecvențe cât mai mari. De asemenea, pentru frecvențe mai mici (de ordinul a câtorva GHz) se va investiga posibilitatea dezvoltării unor structuri de tip Spoof Surface Polaron [banc1] pentru un control îmbunătățit al atenuării.

Dielectrice- Tematica abordată își propune înțelegerea relației dintre microstructura și proprietățile macroscopice pentru proiectarea proprietăților materialelor dielectrice prin analiza ciclului sinteză – microstructura – proprietăți pentru a găsi direcția adecvată către aplicații. Astfel, se urmărește realizarea unor materiale și componente de microunde performante și propune soluții științifice și tehnice inovative prin: i) dezvoltarea de materiale dielectrice de microunde rentabile pe baza de niobiu; ii) proiectarea riguroasă de noi componente pasive de microunde, stabile pe intervale largi de temperatură; realizarea de componente pasive de microunde pentru comunicații fără fir, terestre și spațiale.

Activități:

1. Sinteza materialelor dielectrice pe baza de niobiu prin reacție în fază solidă.
2. Caracterizarea structurală, morfologică și dielectrică a compactelor sinterizate.
3. Modelarea, proiectarea, fabricarea și caracterizarea dispozitivelor pasive de microunde.

Memorii-Capacitive: Se vor obține structuri cu trei straturi cu poarta flotantă din NC de Ge sau GeSi și diferiți oxizi tunel (SiO_2 și/sau HfO_2 sau ZrO_2) folosind metoda de depunere PM și de tratament termic RTA pentru nanostructurare. Se vor ajusta parametrii tehnologici pentru obținerea de proprietăți de memorie optime. Va fi posibilă astfel înțelegerea proceselor de formare a NC de Ge, respectiv a NC de GeSi în oxizi cu constantă dielectrică ridicată pentru obținerea de structuri de memorie cu morfologie optimă a porții flotante care să conducă la proprietăți de memorie îmbunătățite față de cele obținute până în prezent pe baza de NC de Ge în SiO_2 și HfO_2 . De asemenea, se vor modela procesele legate de funcționarea capacitorilor MOS cu poarta flotantă discretă ținând cont de morfologia și compoziția porții flotante.

-Ferroelectrice: Se va urmări influența următorilor parametri asupra amplitudinii gradientului de strain: substrat, materialul electrodului de spate sau a stratului buffer, grosimea stratului ferroelectric, straturi ne-ferroelectrice intermediare, parametri de depunere ca temperatura substrat, presiune oxigen. Folosind metode de caracterizare structurală XRD, TEM se vor analiza diferențele structurale induse de acesti parametri, și se vor obține informații despre mecanismele de formare a gradientilor de strain. Caracterizarea electrică se va realiza pe structuri de tip capacitor și se vor urmări modificările ale proprietăților ferroelectrice și dielectrice macroscopice în relație cu structura obținută.

Prin măsurători de histerezis ferroelectric și capacitate-tensiune se vor investiga proprietățile ferroelectrice și dependența lor de grosime și de tipul de metal folosit ca electrod superior. Din măsurătorile de curent-tensiune efectuate la diverse temperaturi se vor putea obține informații despre valorile curenților de scurgeri și despre mecanismele de conducție.

-Magnetice: Urmând cazul semiconductorului magnetic diluat MnGe publicat anterior [lung11], contribuția științifică a prezentei faze se intenționează a consta în elaborarea de rețete de obținere a unor sisteme MnSi sub formă de straturi subțiri, care să manifeste la temperatura camerei proprietăți de semiconductor magnetic diluat (având temperatura Curie peste cea a camerei), fără a induce în sistem

ordonarea feromagnetică prin incluziuni de alte elemente decât ai ionului magnetic [lung8, lung9] apte pentru a putea fi valorificate în domeniul spintronicii.

-Transisori ambipolari, emisie, contacte- Se vor obține tranzistori organici ambipolari cu emisie de lumina folosind ca și materiale active compusi organometalici pe baza de iridiu. Principalele activități se concentrează asupra obținerii și caracterizării filmelor organometalice prin metode optice și structurale, dar o importanță deosebită în stabilirea și îmbunătățirea randamentului cuantic de emisie va fi reprezentată de obținerea structurilor multistrat de tip bottom/top layer.

Tehnologii pentru sisteme 2D- Experiența preliminară privind modelul de evaporator cu bombardament electronic pentru depunerea straturilor grafenice, care a fost dezvoltat la Trieste, va fi fundamentat prin calcule de disipări termice, în urma cărora va fi definitivat un proiect de execuție. Dipozitivul va fi realizat, asamblat și montat în incinta MBE. Se va testa evaporarea de carbon și se vor ridica curbe de calibrare a vitezei de evaporare în funcție de parametrii evaporatorului. Se vor realiza straturi demonstrative de tip grafenic pe diferite substraturi monocristaline (conductoare sau izolatoare), iar formarea acestor straturi va fi validată prin spectroscopie de fotoelectroni (XPS și ARUPS) și prin microscopie de baleiaj cu efect tunel (STM).

Acoperiri pentru aerospațiale- Datorită multitudinilor de metode de depunere și a materialelor utilizate la ora actuală se folosesc o multitudine de metode de testare a durabilității structurilor TBC depuse pe epruvete sau pe componente ale motoarelor cu turbină, fără a stabili un standard de testare general acceptat la nivel ISO. Faptul se datorează și faptului că metodele de depunere și testare sunt proprietate companiilor producătoare de motoare cu turbină.

Comparativ cu proiectele anterioare derulate în cadrul ROSA, în proiectul de față se urmărește folosirea atât a tehnicilor de depunere în plasma (folosind instalația APS) cât și a mai multor tehnici de analiză a materialelor pentru stabilirea unei metodologii integrate de cercetare-dezvoltare și testare avansată folosind caracterizări morfologo-structurale (difracție de raze X, SEM-EDS, TEM, tomografie de raze X), caracterizări de conductivitate termică și proprietăți mecanice. Prin aceste metode se urmărește identificarea timpurie a fenomenelor de formare a micro-fisurilor, crăpăturilor și exfolierilor în raport cu numărul de cicluri termice, identificarea defectelor de depunere precum segregări și goluri.

Obiectivele proiectului sunt: a) obținerea de structuri TBC care să reziste la un număr crescut de cicluri în testele de durabilitate termică; b) formarea de competențe și metodologii de cercetare-dezvoltare în domeniul materialelor pentru aeronautică.

Fiecare proiect nucleu va parcurge un ciclu de cercetare-dezvoltare care are ca obiect optimizarea structurii și parametrilor de depunere a structurilor de acoperiri cu rol de barieră termică (Thermal Barrier Coatings TBC) obținute prin depuneri în jet de plasma de pulberi de aliaje metalice și ceramice pe epruvete din aliaj inoxidabil.

Fiecare fază va parcurge un flux tehnologic format din următoarele etape:

- depuneri în jet de plasma a structurilor TBC;
- analiză morfologică/chimică/structurală după depunere în jet de plasma;
- analiză proprietăților mecanice și de conductivitate termică după depunere în jet de plasma;
- testare durabilitate termică;
- analiză morfologică/chimică/structurală după testare durabilitate termică;
- analiză proprietăților mecanice și de conductivitate termică după testare durabilitate termică.

Platforma de achiziție a semnalului emis de senzori- Scopul acestor cercetări este: (i) Evaluarea și clasificarea spectrului de semnale electrice produse de senzori nanostructurați, pentru evidențierea etapelor de procesare (hardware/software) necesare pentru a le transforma în date utile. (ii) Realizarea unui lanț de achiziție hardware și software pentru investigarea și procesarea complexă a semnalelor provenite din senzori nanostructurați în condiții experimentale, fără constrângeri de spațiu sau de consum de putere. (iii) Realizarea unui prototip de platformă portabilă de achiziție și procesare semnal, respectiv analiză și stocare date, integrată cu un senzor flexibil destinat purtării umane. (iv) Testarea acestei platforme portabile în condiții de uz zilnic. Printre rezultatele estimate sunt: (i) Crearea unor instrumente de laborator ideal adaptate cerințelor domeniului de cercetare. (ii) Brevetarea unui prototip de biosenzor portabil pentru aplicații în monitorizarea sănătății. (iii) Dobândirea de către personalul de cercetare a unor competențe în domeniul dezvoltării tehnologice de produs, necesare proiectelor de tip transfer tehnologic cu TRL ridicat.

Actuatori pe baza de structuri de PDMS și fibre electrofilate- Se va efectua fabricarea și caracterizarea dispozitivelor de tip actuatori formate din structuri de polidimetilsiloxan (PDMS) și fibre polimerice

electrofilate. Printre rezultatele estimate: (i) Prepararea fibrelor polimerice electrofilate cu morfologii adecvate și conferirea acestora de proprietăți conductoare prin acoperirea cu materiale conductoare; (ii) Obținerea structurilor de PDMS cu caracteristici convenabile aplicației vizate; (iii) Cuplarea fibrelor conductoare cu structurile de PDMS și caracterizarea actuatorului fabricat.

C. Patrimoniu:

Ne propunem efectuarea de investigații fizico-chimice complexe asupra pigmentilor folosiți la decorarea artefactelor, cu ajutorul unor tehnici specifice fizicii (optice, magnetice structurale, morfologice). Se intenționează analiza completă și complexă a materialelor utilizate în coloristica ceramicii și arhitecturii neolitice și din epoca bronzului în România și interpretarea lor în context arheologic. Toate aceste rezultate au deschis posibilitatea de a putea realiza un studiu complet și complex folosind o gamă largă de analize fizico-chimice asupra ceramicii și celorlalte structuri preistorice de lut ars: structurale (analiză XRD), morfologice (microscopie SEM – analiză elementală și optică), analiză termică (DTA/TG), spectroscopie Raman, termoluminescență.

Referințe-Tema 1:

- [1] B. Ostahie, M. Nita, A. Aldea, Phys. Rev. B 89, 165412 (2014).
- [2] B. Ostahie, M. Nita, A. Aldea, Phys. Rev. B 91, 155409 (2015).
- [3] B. Ostahie, A. Aldea, Phys. Rev. B 93, 075408 (2016).
- [4] B. Ostahie, M. Nita, and A. Aldea, Phys. Rev. B 94, 195431 (2016).
- [5] M. Nita, B. Ostahie, and A. Aldea, Phys. Rev. B 87, 125428 (2013).
- [6] M. Nita, M. Tolea și B. Ostahie, Phys. Status Solidi RRL 8, No. 9, 790 (2014).
- [7] M. Tolea and M. Nita, Phys. Rev. B 94, 165103 (2016).
- [8] M. Nita, M. Tolea, D. C. Marinescu, A. Manolescu, arXiv:1711.06001, (2017).
- [9] V. Moldoveanu, I. V. Dinu, and R. Dragomir, Phys. Rev. B 89, 245415 (2014).
- [10] V. Moldoveanu, I. V. Dinu, R. Dragomir, and B. Tanatar, Phys. Rev. B 93, 165421 (2016).
- [11] I. V. Dinu, V. Moldoveanu, V., R. Dragomir, B. Tanatar, Physica Status Solidi B 254, 1600800 (2017).
- [12] V. Moldoveanu, I. V. Dinu, B. Tanatar, Superlattices and Microstructures 87, (2015).
- [13] V. Moldoveanu, I. V. Dinu, B. Tanatar, C. P. Moca, New Journal of Physics 17, 083020 (2015).
- [14] I. Pintilie, V. Stancu, A. Tomulescu, R. Radu, C. Besleaga Stan, L. Trinca, and L. Pintilie, Materials and Design, 135 112, (2017).
- [15] C. Besleaga, L. E. Abramiuc, V. Stancu, A. G. Tomulescu, M. Sima, L. Trinca, N. Plugaru, L. Pintilie, G. A. Nemnes, M. Iliescu, H. G. Svavarsson, A. Manolescu, and I. Pintilie, The Journal of Physical Chemistry Letters, 7(24), 5168 (2016).
- [16] G. A. Nemnes, C. Besleaga, A. G. Tomulescu, Ioana Pintilie, L. Pintilie, K. Torfason, and A. Manolescu, Solar Energy Materials and Solar Cells, 159(Supplement C):197 (2017).
- [17] N. Plugaru, G. A. Nemnes, L. Filip, I. Pintilie, L. Pintilie, K. T. Butler, and A. Manolescu, The Journal of Physical Chemistry C 121, 9096 (2017).
- [18] A. G. Boni, C. Chirila, I. Pasuk, R. Negrea, I. Pintilie, and L. Pintilie, Physical Review Applied, 8 034035 (2017).
- [19] A. G. Boni, L. Filip, C. Chirila, I. Pasuk, R. Negrea, I. Pintilie, and L. Pintilie, Nanoscale, 2017.
- [20] L. D. Filip and L. Pintilie, The European Physical Journal B 89, 44 (2016).
- [21] L. D. Filip, L. Pintilie, V. Stancu, and I. Pintilie, Thin Solid Films, 592 200 (2015).
- [22] L. D. Filip, I. Pintilie, L. C. Nistor, and B. G. Svensson, Thin Solid Films 545, 22 (2013).
- [23] S. V. Nistor, M. Stefan, L. C. Nistor, V. Kuncser, D. Ghica, I. Vlaicu, Journal of Physical Chemistry C, 120, 14454 (2016).
- [24] L.M. Hrib, L. Pintilie, M. Alexe, Scientific Reports 7, 6563 (2017).
- [25] B. Borca et al., ACS Nano 11, 4703 (2017).
- [26] B. Borca et al., ACS Nano 9, 12506 (2015).
- [27] V. Schendel, B. Borca et al., Nano Letters 16, 93 (2015).
- [28] D. Stradi, B. Borca et al., RSC Advances 6, 15071 (2016).
- [29] L.C. Tanase, N.G. Apostol, L.E. Abramiuc, C.A. Tache, L. Hrib, L. Trupina, L. Pintilie, C.M. Teodorescu, Scientific Reports 6, 35301 (2016).
- [30] L. Pintilie, M. Alexe, J. Appl. Phys. 98, 124103 (2005).

- [31] L. Pintilie et al., Scientific Reports 5, 14974 (2015).
- [32] C.M. Teodorescu, L. Pintilie, N.G. Apostol, R.M. Costescu, G.A. Lungu, L. Hrib, L. Trupina, L.C. Tanase, I.C. Bucur, A.E. Bocirnea, Phys. Rev. B 96, 115438 (2017).
- [33] N.G. Apostol, C.M. Teodorescu, Surface Science Characterization Techniques for Nanomaterials, C. Kumar (Ed.), Springer, Berlin, pp. 405-461 (2015).
- [34] D. G. Popescu, N. Barrett, C. Chirila, I. Pasuk, and M. A. Husanu, Phys. Rev. B 92, 235442 (2015).
- [35] M. Baibarac, A. Nila, I. Baltog, RSC Advances 6, 58003 (2016).
- [36] M. Baibarac, I. Baltog, I. Smaranda, A. Magrez, Carbon 81, 426, (2015).
- [37] M. Baibarac, M. Ilie, I. Baltog, S. Lefrant, B. Humbert, RSC Advances 7, 6931 (2017).
- [38] I. Smaranda, A.M. Benito, W.K. Maser, I. Baltog, M. Baibarac, I. Smaranda, J. Phys. Chem. C 118, 25704 (2014).
- [39] I. Smaranda, M. Baibarac, I. Baltog, J.Y. Mevellec, S. Lefrant, Journal of Solid State Chemistry 197, 352 (2013).
- [40] O. I. Negru, M. Grigoras, Iranian Polymer Journal 22, 641 (2013).
- [41] A.D. Bendrea, L. Vacareanu, M. Grigoras, Polymer International 59, 624 (2010).
- [42] M. Baibarac, I. Baltog, I. Smaranda, A. Magrez, Carbon 81, 426 (2015).
- [43] M. Baibarac, I. Baltog, S. Frunza, A. Magrez, D. Schur, S. Y. Zaginichenko, Diamond and Related Materials 32, 72 (2013).
- [44] M. Baibarac, I. Baltog, S. Lefrant, P. Gomez-Romero, Materials Science and Engineering B Advanced Functional Solid-State Materials 176, 110 (2011).
- [45] C. Bartha, C. E. Secu, E. Matei, et al., Cryst. Eng. Comm 19, 4992 (2017).
- [46] M. Secu, C. E. Secu, Journal of the European Ceramic Society 36, 1699 (2016).
- [47] C. E. Secu, M. Secu, F. Stokker-Cheregi, F. et al., Thin Solid Films 625, 6 (2017).
- [48] C.E. Secu et al., Radiation Measurements 68, 38, (2014).
- [49] M. Secu et al., Mater. Chem. Phys. 151, 81, (2015).
- [50] Markus Konig et. al. Science 318, 766 (2007).
- [51] A. Kitaev, AIP Conf. Proc. 1134, 22 (2008).
- [52] A. A. Burkov and L. Balents, Phys. Rev. Lett. 107, 127205 (2011).
- [53] J-M. Hou, Phys. Rev. Lett 111, 130403 (2013).
- [54] S. Murakami, New J. Phys. 9, 356 (2007).
- [55] S-Y Xu et. al., Science 349, 613 (2015).
- [56] S-M. Huang et. al., Nature Commun. 6, 7373 (2015).
- [57] H. Weng. et. al., Phys. Rev. X 5, 011029 (2015).
- [58] Kane, C. L., E. J. Mele, Phys. Rev. Lett. 95, 226801, (2005).
- [59] Bernevig, B. A., S. C. Zhang, Phys. Rev. Lett. 96, 106802, (2006).
- [60] M. S. Konig, C. Wiedmann, A. Brune, H. Roth, W. Buhmann, L. W. Molenkamp, X. L. Qi and S. C. Zhang, Science 318 766 (2007).
- [61] L. C. Fu, C. L. Kane and E. J. Mele, Phys. Rev. Lett. 98, 106803 (2007).
- [62] D. Hsieh, et al., Nature 452, 970 (2008).
- [63] D. Hsieh, et al., Nature 460, 1101 (2009).
- [64] Checkelsky, J. G., Hor, Y., Cava, R. J. and Ong, N., Phys. Rev. Lett. 106, 196801 (2011).
- [65] H. Beidenkopf et al., Nat. Phys. 7, 939 (2011).
- [66] Y. Xia et al., Nature Phys. 5, 398 (2009).
- [67] Y. L. Chen et al., Science 325, 178 (2009).
- [68] T. Sato et al., Phys. Rev. Lett. 105, 136802 (2010).
- [69] K. Kuroda et al., Phys. Rev. Lett. 105, 146801 (2010).
- [70] R. E. Samuel, Nature 506, 7486, (2014).
- [71] A. H. Woomer, T. W. Farnsworth, J. Hu, R. A. Wells, C. L. Donley, S. C. Warren, ACS Nano 9, 8869 (2015).
- [72] Y. Cai, G. Zhang, Y. W. Zhang, Sci. Rep. 4, 6677 (2014).
- [73] S. Zhang et al., ACS Nano 8, 9590 (2014).
- [74] J. Wu, N. Mao, L. Xie, H. Xu, J. Zhang, Angew. Chem. Int. Edit. 54, 2366 (2015).
- [75] M. Baibarac, A. Nila, I. Baltog, RSC Adv. 6, 58003 (2016).
- [76] J.U. Kim, H. Lee, Z. Park, C. Lee, H. Cheong, Nanoscale 7, 18708 (2015).
- [77] H. B. Ribeiro et al., ACS Nano 4, 4270 (2015).

- [78] J. Dai, X. C. Zheng, RSC Adv. 4, 48017 (2014).
- [79] E. Passaglia et al., RSC Adv. 6, 5377 (2016).
- [80] Z. M. Zhang, L. Zheng, M. Khurram, Q. F. Yan, Nanotechnology 28, 424001 (2017).
- [81] C. Y. Zhi et al., Adv. Mater. 21, 2889 (2009).
- [82] J. N. Coleman et al., Science 331, 568 (2011).
- [83] D. Hanlon et al., Chem. Mater. 26, 1751 (2014).
- [84] A. Harvey et al., Chem. Mater. 27, 3483 (2015).
- [85] J. Kang et al., ACS Nano 9, 3596 (2015).
- [86] A. Reina et al., Nano Lett. 9, 30 (2009).
- [87] J. Sun et al., Nature Nanotechnol. 10, 980 (2015).
- [88] J. Biscarat et al., Nanoscale 7, 613 (2015).
- [89] F. Withers et al., Nano Lett. 14, 3987 (2014).
- [90] G. Cunningham et al., ACS Nano 6, 3468 (2012).
- [91] R. J. Smith et al., Adv. Mater. 23, 3944 (2011).
- [92] B. Mendoza-Sanchez, Electrochim. Acta 174, 696 (2015).
- [93] F. Torrisi et al., ACS Nano 6, 2992 (2012).
- [94] T. Tada and K. Yoshizawa, Chemphyschem 12, 1035 (2002).
- [95] M. Nita, M. Tolea si B. Ostahie, Phys. Status Solidi Rapid Research Letters 8, 790 (2014).
- [96] K. Pedersen et al., Phys. Rev. B 90, 125413 (2014).
- [97] G. Solomon, Nature Chemistry, vol7, 621 (2015).
- [98] X. Zhao et al., The Journal of Chemical Physics 146, 092308 (2017).
- [99] L. Malysheva and A. Onipko, Phys. Rev. Lett. 100, 186806 (2008).
- [100] A. Onipko, Phys. Rev. B 78, 245412 (2008).
- [101] M. Ezawa, New Journal of Physics 16, 115004 (2014).
- [102] I. Klefogiannis and I. Amanatidis, Eur. Phys. J. B 87:16 (2014).
- [103] Y-X Wang and Y-M Wu, Physica B 478, 84 (2015).
- [104] J. Junquera and P. Ghosez, Journal of Computational and Theoretical Nanoscience 5, 2071 (2008).
- [105] G. Volonakis, M. R. Filip, A. A. Haghighirad, N. Sakai, B. Wenger, H. J. Snaith, and F. Giustino, The Journal of Physical Chemistry Letters 7, 1254 (2016).
- [106] M. R. Filip, S. Hillman, A. A. Haghighirad, H. J. Snaith, and F. Giustino, The Journal of Physical Chemistry Letters 7, 2579 (2016).
- [107] M. R. Filip and F. Giustino, The Journal of Physical Chemistry C 120, 166 (2016).
- [108] K. T. Butler, B. J. Dringoli, L. Zhou, P. M. Rao, A. Walsh, and L. V. Titova, Journal of Materials Chemistry A 4, 18516 (2016).
- [109] K. T. Butler, J. M. Frost, and A. Walsh, Materials Horizons 2, 228 (2015).
- [110] K. T. Butler, Y. Kumagai, F. Oba, and A. Walsh, Journal of Materials Chemistry C 4, 1149 (2016).
- [111] S. Hu et al., The Journal of Physical Chemistry C 121, 23045 (2017).
- [112] T. Yajima, Y. Hikita, M. Minohara, C. Bell, J. A. Mundy, L. F. Kourkoutis, D. A. Muller, H. Kumigashira, M. Oshima, and H. Y. Hwang, Nature Communications 6, 6759 (2015).
- [113] H. Molegraaf et al., Adv. Mater. 21, 3470 (2009).
- [114] R. Ramesh, N. A. Spaldin et al., Nature Materials 6, 21 (2007).
- [115] C. G. Duan et al., Phys. Rev. Lett. 97, 047201 (2006).
- [116] Y. W. Yin et al., Nature Materials 12, 397 (2013).
- [117] J. Burton et al., Phys. Rev. Lett. 106, 157203 (2011).
- [118] S.-W. Cheong, M. Mostovoy, Nature Mater. 6, 13 (2007).
- [119] R. Ramesh, N. A. R. Spaldin, Nature Mater. 6, 21 (2007).
- [120] H. Hwang et al., Nature Mater. 11, 103 (2012).
- [121] P. Lunkenheimer et al., Nature Mater. 11, 755 (2012).
- [122] G. Rogez et al., Angew. Chem. Int. Ed. 49, 1921 (2010).
- [123] C. Wagner, M. F. B. Green, P. Leinen, T. Deilmann, P. Kruger, M. Rohlfing, R. Temirov, and F. S. Tautz, Phys. Rev. Lett. 115, 026101 (2015).
- [124] S. D. Bennett et al., Phys. Rev. Lett. 104, 017203 (2010).
- [125] I. G. Rau et al., Science 344, 988 (2014).
- [126] M. Ternes, New J. Phys. 17, 063016 (2015).
- [127] W-X Wang, H. Jiang, Y. Zhang, S-Y Li, H. Liu, X. Li, X. Wu, and L. He, Phys. Rev. B

- 96, 115434 (2017).
- [128] T. Knispel, W. Jolie, N. Borgwardt, J. Lux, Zhiwei Wang, Yoichi Ando, A. Rosch, T. Michely, and M. Gruninger, *Phys. Rev. B* 96, 195135 (2017).
- [129] D. Toroz, M. Rontani, and S. Corni, *Phys. Rev. Lett.* 110, 018305 (2013).
- [130] J. R. Friedman, M. P. Sarachik, *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* 1, 109 (2010).
- [131] L. Bogani L and W. Wernsdorfer, *Nature Mater.* 7, 179 (2008).
- [132] S. Sanvito S, *Chem. Soc. Rev.* 40, 3336 (2011).
- [133] H. B. Heersche et al., *Phys. Rev. Lett.* 96, 206801 (2006).
- [134] M. Jo et al., *Nano. Lett.* 6, 2014 (2006).
- [135] M. Ganzhorn, S. Klyatskaya, M. Ruben, and W. Wernsdorfer, *ACS Nano* 7, 6225 (2013).
- [136] M. Ganzhorn, S. Klyatskaya, M. Ruben, and W. Wernsdorfer, *Nature Nanotech.* 8, 165 (2013).
- [137] J. Bruggemann, S. Weiss, P. Nalbach, and M. Thorwart, *New J. Phys.* 18, 023026 (2016).
- [138] J. Bruggemann, S. Weiss, P. Nalbach, and M. Thorwart, *Phys. Rev. Lett.* 113, 076602 (2014).
- [139] N. Kocic et al., *Nano Lett.* 15, 4406 (2015).
- [140] K. Hennessy et al., *Nature* 445, 896 (2007).
- [141] K. De Greve et al., *Rep. Prog. Phys.* 76, 092501 (2013).
- [142] W. W. Chow, F. Jahnke, *Progress in Quantum Electronics* 37, 109 (2013).
- [143] P. Lodahl et al., *Rev. Mod. Phys.* 87, 347 (2015).
- [144] A. N. Varnivakas, Y. Zhao, C. Y. Lu and M. Atature, *Nature Phys.* 5, 198 (2009).
- [145] Boyle S J, Ramsay A J, Heberle A P, Hopkinson M, Fox A M, and Skolnick M S, *Phys. Rev. Lett.* 102, 207401 (2009).
- [146] X. Xu, B. Sun, P. R. Berman, D. G. Steel, A. S. Bracker, D. Gammon and L. J. Sham, *Science* 317, 929 (2007).
- [147] A. Petr, C. Kvarnstrom, L. Dunsch, A. Ivaska, *Synth. Met.* 108, 245 (2000).
- [148] C. Su, Y. P. Ye, X. D. Bu, L. H. Xu, C. Zhang, *Advanced Materials and Structures*, Pts 1 and 2, 335, 1512 (2011).
- [149] C. O. Sanchez, J. C. Bernede, L. Cattin, M. Makha, N. Gatica, *Thin Solid Films* 562, 485 (2014).
- [150] O. I. Negru, M. Grigoras, *Iranian Polymer Journal* 22, 641 (2013).
- [151] A. D. Bendrea, L. Vacareanu, M. Grigoras, *Polymer International* 59, 624 (2010).
- [152] X. Li, D. Zhao and F. Zhang, *Theranostics* 3, (2013).
- [153] H.-T. Wong, H. L. W. Chan, and J. H. Hao, *Appl. Phys. Lett.* 95, 022512 (2009).
- [154] C. Liu et al., *ACS Nano* 7, 7227 (2013).
- [155] R. Kumar et al, *Adv. Funct. Mater.* 19, 853 (2009).
- [156] D. Chen et al., *J. Mater. Chem.*, 21, 6186 (2011).
- [157] J. Zhang, H. Riesen, *Chemical Physics Letters* 1-4, 641 (2015).

Referinte-Tema 2

Teorie si metodologii

- T1. A. Birsan J. *Alloys Compd* 710 (2017) 339
- T2. A. Birsan, V Kuncser J. *Magn Magn Mater* 406 (2016) 282
- T3. A. Birsan J. *Alloys Compd* 598 (2014) 230
- T4. K. Togano, P. Badica, Y. Nakamori, S. Orimo, H. Takeya and K. Hirata, *Phys. Rev. Lett.* 93, 247004 (2004).
- T5. P. Badica, T. Kondo and K. Togano. *J. Phys. Soc. Jpn.* 74 1014–1019 (2005).
- T6. P. Badica, S. Salem-Sugui Jr., A. D. Alvarenga and G. Jakobi, *Supercond. Sci. Technol.* 23 105018 (2010).
- T7. A. Kuncser, S. Antohe, V. Kuncser, *JMMM*, 423, 34-38, 2017
- T8. Lungu G.A., Stoflea L.E., Tanase L.C., Bucur I.C., Răduțoiu N., Vasiliu F., Mercioniu I., Kuncser V., Teodorescu C.-M., *Materials* 2014, 7, 106-129]
- T9. Bocirnea A.E., Costescu R. M., Pasuk I., G. A. Lungu G. A., Teodorescu C. M., *Appl. Surf. Sci.* 424 (2017) 337–344
- T10. S.V.Nistor, M.Stefan, L.C.Nistor, D.Ghica, I.D.Vlaicu, A.C.Joita J.of Physics and Chemistry C 119 (2015)23781
- T11. K.Sato, H.Katayama-Yoshida, *Semiconductor Science and Technology* 17 (2002) 367
- T12. T.Chanier, F.Virot and R. Hayn *Physical Review B* 79 (2009) 205204

- T13. S. Hurand et al., *Sci. Rep.* 5 12751 (2015).
- T14. L. Begon-Lours et al., *Phys. Rev. Appl.*, 7 064015 (2017).
- T15. Bals S., Goris B., De Backe, A., Van Aert S., Van Tendeloo G., Atomic resolution electron tomography, *MRS Bulletin*, 41(7), 525-530, 2016
- T16. C. Detavernier, A.S. Ozcan, J. Jordan-Sweet, E.A. Stach, J. Tersoff, F.M. Ross, C.Lavoie, *Nature* 426 (2003) 641–645]

Dimensionalitate Redusa (0D si 2D)

- D1. D. Gingasu, I. Mindru, L. Patron, J.M. Calderon-Moreno, O.C. Mocioiu, S. Preda, N. Stanica, S. Nita, N. Dobre, M. Popa, G. Gradisteanu, M.C. Chifiriuc, *J. Nanomater.* 2016 (2016) Article ID 2106756.
- D2. Mindru I., Gingasu D., Marinescu G., Patron L., Calderon-Moreno JL., Bartha C., Andronesu C., Crisan A., “, *Ceramics international*, Vol. 40, Issue: 9, (2014) Pages: 15249-15258
- D3. L.C. Tănase, N.G. Apostol, L.E. Abramiuc, C.A. Tache, L. Hrib, L. Trupină, L. Pintilie, and C.M. Teodorescu, *Sci. Rep.* 6, 35301 (2016).
- D4. P. Palade, C. Plapcianu, I. Mercioniu, C. Comanescu, G. Schinteie, A. Leca, R. Vidu, “Structural, Magnetic, and Mössbauer Investigation of Ordered Iron Nitride with Martensitic Structure Obtained from Amorphous Hematite Synthesized via the Microwave Route”, *Ind. Eng. Chem. Res.* 56(11) (2017) 2958-2966
- D5. N. Iacob, G. Schinteie, P. Palade, V. Kuncser, “Approach for an improved experimental evaluation of the specific absorption rate in magnetic fluid hyperthermia”, *J. Nanopart. Res.* 17(4) (2015) article no.190
- D6. N. Iacob, G. Schinteie, P. Palade, C. M. Ticos, V. Kuncser, “Stepped heating procedure for experimental SAR evaluation of ferrofluids”, *Eur. Phys. J. E* 38(6) (2015) article no. 57
- D7. N. Iacob, G. Schinteie, C. Bartha, P. Palade, L. Vekas, V. Kuncser, “Effects of magnetic dipolar interactions on the specific time constant in superparamagnetic nanoparticle systems”, *J. Phys. D: Appl. Phys.* 49(29) (2016) article no. 295001
- D8. D. Dadarlat, I. Craciunescu, R. Turcu, C. Tripon, “Photopyroelectric characterization of magnetic nanofluids. Influence of type and size of the nanoparticles on the thermal parameters”, *Int. J. Therm.* 38(6) (2017) article no. 86
- D9. C. Iacovita, A. Florea, R. Dudric, E. Pall, A. I. Moldovan, R. Tetea, R. Stiufiuc, C. M. Lucaciu, “Small versus large iron oxide magnetic nanoparticles: hyperthermia and cell uptake properties”, *Molecules* 21 (2016) 1357
- D10. I. Astefanoaei, H. Chiriac, A. Stancu, “Thermal performance of Fe-Cr-Nb-B systems in magnetic hyperthermia”, *J. Appl. Phys.* 121(10) (2017) article no. 104701.
- D11. F. Neațu, G. Culică, M. Florea, V. I. Parvulescu, F. Cavani, *ChemSusChem* 9 (21), 3102–3112 (2016);
- D12. F. Neațu, R.S. Marin, M. Florea, N. Petrea, O.D. Pavel, V.I. Parvulescu, *Appl. Catal., B* 180, 751–757 (2016).
- D14. V. Kuncser, G. Schinteie, A.Kuncser, A. Leca, M. Scarisoreanu, I. Morjan and G.Filoti, *Journal of Physical Chemistry*, 2017
- D15. M. Cernea, V. Mihalache, E.C. Secu, R. Trusca, V. Bercu, L. Diamandescu, *Superlattice Microst.* 104 (2017) 362-373.
- D16. F. Tolea, MN Grecu, V. Kuncser, SG. Constantinescu, D. Ghica, *Appl. Phys. Letters* 106 (2015) 142404
- D17. T. Popescu, A.R. Lupu, V. Raditoiu, V. Purcar, V.S. Teodorescu, *Journal of Colloid and Interface Science* 457: 108–120, 2015
- D18. A-R Lupu, T Popescu, *Toxicology in vitro*, 27(5) 1445-50, 2013
- D19. T. Popescu, A-R. Lupu, L. Diamandescu, D. Tarabasanu- Mihaila, V.S. Teodorescu, V. Raditoiu, V. Purcar, A.M. Vlaicu, *Journal of Nanoparticle Research*, 15:1449, 2013,
- D20. L.M. Trinca et al, *Rom. Rep. Phys.* 69 (2017) 506.
- D21. Besleaga C. et al. 2016. Transparent field-effect transistors based on AlN-gate dielectric and IGZO-channel semiconductor. *Applied Surface Science.* 379:270-276.
- D22. Galca A.C. et al. 2010. Optical properties of zinc oxide thin films doped with aluminum and lithium. *Thin Solid Films.* 518(16):4603-4606.
- D23. G. A. Nemnes et al, *J. Phys. Chem. C* 121, 11207, 2017
- D24. M.Cernea et al, *J Mater Sci* (2012) 47:6966–6971,

- D25. M. Cernea et al, Journal of Alloys and Compounds 515 (2012) 166– 170,
- D26. C. Dragoi et al, Applied Surface Science 257 (2011) 9600– 9605].
- D27. Chirila, C; Boni, AG; Pasuk, I; Negrea, R; Trupina, L; Le Rhun, G; Yin, S; Vilquin, B; Pintilie, I; Pintilie, L, *Comparison between the ferroelectric/electric properties of the $PbZr_{0.52}Ti_{0.48}O_3$ films grown on Si (100) and on STO (100) substrates*, Journal of Materials Science, 50(11) (2015), 3883-3894
- D28. Pintilie, L. Trinca, L. Trupina, I. Pasuk, L. Pintilie, *Relation between domain structure and pyroelectric response in as-grown epitaxial $Pb(Zr_{0.2}Ti_{0.8})O_3$ thin films on substrates with different resistivity*, Materials Research Bulletin 93 (2017) 201–207
- D29. P. Mele, A. Crisan and Malik I. Adam, in „Vortices and Nanostructured Superconductors”, A. Crisan (ed.), Springer Series in Materials Science 261 (2017).
- D30. A. Crisan and H. Ihara. Japanese patent 2003008090, US patent 7491678, EU patent 1418632.
- D31. A. Crisan, S. Fujiwara, J.C. Nie, A. Sundaresan, H. Ihara, Appl. Phys. Lett. 79, (27) 4547-4549 (2001).
- D32. P. Mikheenko, V.-S. Dang, M. M. Awang Kechik, A. Sarkar, P. Paturi, H. Huhtinen, J. S. Abell and A. Crisan, IEEE Trans. Appl. Supercond. 21 (3) 3184-3188 (2011).
- D33. A. Crisan, V.S. Dang, P. Mikheenko, A.M. Ionescu, I. Ivan, L. Miu, Supercond. Sci. Technol. 30, 045012 (2017).
- D34. V.Kuncser, P.Palade, A.Kuncser, S.Greculeasa and G. Schinteie, Size Effects in Nanostructures, Basics and Applications, V. Kuncser and L. Miu (eds.) Springer, pp 169-237, 2014
- D35. Kuncser V., Keune W., Journal of Magnetism and Magnetic Materials 323 (16) 2196-2201 (2011),
- D36. Kuncser V., Keune W, von Hoersten U, Schinteie G, Stefan N., Palade P., Filoti G., Thin Solid Films 518 21 5981-5985 (2010)
- D37. A. Manikandan, M. Durka, S. Arul Antony, *Hibiscus rosa-sinensis* leaf extracted green methods, magneto-optical and catalytic properties of spinel $CuFe_2O_4$ nano- and microstructures, J. Inorg. Organomet. Polym. 25 (2015) 1019–1031.
- D38. K. Garrity, A. M. Kolpak, S. Ismail-Beigi, and E. I. Altman, Adv. Mater. 22, 2969–2973 (2010).
- D39.. C. Y. Chao, Z. H. Ren, Y. H. Zhu, Z. Xiao, Z. Y. Liu, G. Xu, J. Q. Mai, X. Li, G. Shen, and G. R. Han, Angew. Chem. Int. Ed. 51, 9283–9287 (2012)
- D40. L. Li, P. A. Salvador and G. S. Rohrer, Nanoscale 6, 24–42 (2014).
- D41. S. Lee, H. Kim, E. Lim, Y. Kim, Y. Noh, G. Huber, W. Kim, , Green Chem. 18, 2877-2887
- D42. J. Barault, Clances, Y. Pouilloux, Top. Catal., 27, 137-142, 2004.
- absorption rate for cancer cell hyperthermia treatment”, ACS Nano 6(4) (2012) 3080
- D43. S. Betal et al., Integrated Ferroelectrics, 166 (2015) 225-231.
- D44. P.N. Oliveira et al., Ferroelectrics 499 (2016) 76-82.
- D45. R.A. Islam et al., J. Appl. Phys. 104 (2008) 104111.
- D46. J.P. Zhou et al., Sci. Technol. Adv. Mater. 13 (2012) 045001.
- D47. Z. L. Wang, Phys.: Condens. Matter. 16 (2004) R829–R858.
- D48. U. Ozgur, Y.I. Alivov, C. Liu, A. Teke, M. A. Reshchikov, S. Dogan, et al., J. Appl. Phys. 98 (2005) 041301.
- D49. Wang, Z.; Yu, R.; Pan, C.; Li, Z.; Yang, J.; Yi, F.; Wang, Z. L., Nat. Commun. 6 (2015) 8401.
- D50. S.M. Lam, J.C. Sin, A.Z. Abdullah, A.R. Mohamed, Desalin. Water Treat. 41 (2012) 131–169.
- D51. C. Nistor, C. Ghica, V. Kuncser, D. Pantelica, J-J. Grob, G. Epurescu, and M. Dinescu, J.Phys. D: Appl. Phys. 46 (2013) 065003
- D52. A. Khatamian, A. Khandar, B. Divband, M. Haghighi, S. Ebrahimiasl, J. Mol. Catal. A: Chem. 365 (2012) 120–127.
- D53. C. Karunakaran, P. Gomathisankar, G. Manikandan, Mater. Chem. Phys. 123 (2010) 585–594
- D54. M.I. Ghouri, E. Ahmed, N.R. Kha;id , M. Ahmed, M. Ramzan, A. Shakoor, N.A. Niaz, J. Ovonic Res. 10 (2014) 89 – 100.
- D55. Surender Kumar, P.D. Sahare, Nd-doped ZnO as a multifunctional nanomaterial, J. Rare Earths 30 (2012) 761-767.
- D56. S. Yi, J. Cui, S. Li, L. Zhang, D. Wang, Y. Lin, Appl. Surface Sci. 319 (2014) 230–236.
- D57. Supawan Joonwichien, Eiji Yamasue, Hideyuki Okumura and Keiichi Ishihara, J. Chem. Chem. Eng. 5 (2011) 729-737
- D58. Hideyuki Okumura, Int J Magnetism Electromagnetism 2016, 2:004

- D59. H. Okumura, S. Endo, S. Joonwichien, E. Yamasue, K.N. Ishihara, Magnetic field effect on heterogeneous photocatalysis, *Catalysis Today*, 258 (2), 2015, 634–647
- D60. Wakasa, M.; Ishii, N.; Okano, *Comptes Rendus Chimie* 2006, 9, 836-840.
- D61.. Wakasa, M.; Suda, S.; Hayashi, H.; Ishii, N.; Okano, M. *The Journal of Physical Chemistry B*, 2004, 108, 11882-11885.
- D62. T.S. Böske *et al*, *Appl. Phys. Lett.* 99 (2011) 102903;
- D63. S. Mueller *et al*, *Adv. Funct. Mater.* 22 (2012) 2412;
- D64. J. Müller *et al*, *Nano Lett.* 12 (2012) 4318;
- D65. Pintilie I. et al. 2017. Properties of perovskite ferroelectrics deposited on F doped SnO₂ electrodes and the prospect of their integration into perovskite solar cells. *Materials & Design.* 135:112-121
- D66. Lee J.H. et al. 2016. Effect of pre-annealing on the phase formation and efficiency of CZTS solar cell prepared by sulfurization of Zn/(Cu,Sn) precursor with H₂S gas. *Solar Energy* 136:499–504
- D67. Ciobotaru C.C. et al. 2017. Enhancement of the electroluminescence of organic light emitting devices based on Ir(ppy)₃ by doping with metallic and magnetic nanoparticles. *Materials Science in Semiconductor Processing.* 72:78-84
- D68. Ei Hang, Limin Kang, Meiling Yuan, Qian Yang, Jun Ouyang, Effect of bottom electrode on the microstructure and electrical properties of sputtered BaTiO₃ films on MgO substrates, *Journal of Alloys and Compounds* 580 (2013) 363–368
- D69. Yali Lin, Jun Zhu, Zhipeng Wu, Wenbo Luo & Yanrong Li, Enhanced Ferroelectric Properties of Pb(Hf_{0.3}Ti_{0.7})O₃ Thin Films by SrRuO₃ Bottom Electrode, *Ferroelectrics* Volume 492, (2016), 143-149
- D70. J. Zhu, L. Zheng, W.B. Luo, Y.R. Li, Y. Zhang, Microstructural and electrical properties of BaTiO₃ epitaxial films on SrTiO₃ substructures with a LaNiO₃ conductive layer as a template, *J. Phys. D: Appl. Phys* 39 (2006) 2438-2443.
- D71. L. N. Bulaevskii, E. M. Chudnovsky, and M. P. Maley, *Appl. Phys. Lett.* 76, 2594 (2000)
- D72. Alok K. Jha et al., *J. Appl. Phys.* 110, 113920 (2011).
- D73. V. Vlasko-Vlasov et al., *Phys. Rev. B* 85, 064505 (2012).

Nanocomposite:

- N1. J. L. Delgado, P. de la Cruz, F. Langa, A. Urbina, J. Casado, J. T. López Navarrete, *Chem. Commun.* 2004, 1734–1735
- N2. B.J. Adzima, C.J. Kloxin, C.A. DeForest, K. S. Anseth, C. N. Bowman, *Macromol. Rapid Commun.* 2012, 33, 2092–2096
- N3. G. Delaittre, N. K. Guimard, C. Barner-Kowollik, *Acc. Chem. Res.* 2015, 48, 1296–1307
- N4. M.E.C. Graupera, R.A. Brito, N. Davidenko, P.O. Deltoro, *Anales de Quimica* 1992, 88 (3), 294-296
- N5. D. Zaldívar, C. Péniche, A. Gallardo, J. SanRomán, *Biomaterials*, 1993, 14 (14), 1073-1079.
- N6. H. Du et al., *Journal of Alloys and Compounds* 663 (2016) 848
- N7. V.G. Konakov et al., *Rev. Adv. Mater. Sci.* 44 (2016) 361
- N8. M. Galatanu et al., *Fus. Eng. Des.* 88 (2013) 2598
- N9. D.V. Dudina et al., *J. Cer. Soc. Jpn* 124 (2016) 289.
- N10. E.A. Levashov et al., *Int. Mat. Rev* 62 (2017) 203.
- N11. I. Duarte and J.M.F. Ferreira, *Materials* 2016, 9, 79
- N12. E.C. Hammel et al., *Ceramics International* 40 (2014) 15351
- N13. K. Inumaru, *J. Cer. Soc. Japan* 124 (2016) 1110.
- N14. S. Saced et al., *Light: Sci. & Appl.* 4 (2015) e251
- N15. D. Carolan, *Progress Mat. Sci.* 90 (2017), 128
- N16. P. Manousiadis et al., *J. Appl. Phys.* 113 (2013) 043703
- N17. I. Stavarache, A.M. Lepadatu, T. Stoica, M.L. Ciurea, *Appl. Surf. Sci.* 285 (2013) 175
- N18. D. Stange et al., *Optica* 4 (2017) 185
- N19. M.L. Ciurea, I. Stavarache, A.M. Lepadatu, I. Pasuk, V.S. Teodorescu, *Phys. Status Solidi B* 251 (2014) 1340
- N20. Goossens, K.; Lava, K.; Bielawski, C.W.; Binnemans, K., *Chem. Rev.* 2016, 116(8), 4643-4807.
- N21. S. Handy, editor, *Developments in Ionic Liquids*. InTech. 2017
- N22. Rahman, M. & Lee, W. *J. Phys. D: Appl. Phys.* 2009, 42, (063001-1)-(063001-12),

- N23. Dolgov, L., Kovalchuk, O., Lebovka, N., Tomylo, S., Yaroshchuk, O. Liquid crystal dispersions of carbon nanotubes: dielectric, electro-optical and structural peculiarities. In Carbon Nanotubes; Marulanda J. M., Ed.; InTech: Rijeka, Croatia. 2010; pp 451-484
- N24. S. Frunza, A. Schonhals, L. Frunza, P. Ganea, H. Kosslick, J. Harloff, A. Schulz, J. Phys. Chem. B, 114, 12840-12846, 2010
- N25. Dierking, I.; Casson, K.; Hampson, R. Jpn. J. Appl. Phys. 2008, 47, 6390–6393.
- N26. J.E. Davie, O. Hellwiga, E.E. Fullerton, Appl. Phys. Lett. 86 (2005) 262501.
- N27. M. Cernea, S.-G. Sandu, C. Galassi, R. Radu, V. Kuncser, J Alloy Compound 561 (2013) 121.
- N28. V. Harikrishnan and R. Ezhil Vizhi, J. Magn. Magn. Mater. 418 (2016) 217.
- N29. F. Song, X. Shen, M. Liu, J. Xiang, J. Solid State Chem. 185 (2012) 31.
- N30. Kainuma R Imano Y, Ito W, Sutou Y, Morito H, Okamoto S et al, Nature 2006; 439-957.
- N31. T. Omori, K. Watanabe, R. Y. Umetsu, R. Kainuma, and K. Ishida Appl. Phys. Lett. 2009;95; 082508 .
- N32. Tang X, Wang W,, Zhu W, Liu E., Wu G. Meng F. Appl Phys Lett 2010;97.
- N33. H. Okumura, E. Hashiba, K. Nagata, Intermetallics 2014; 49; 65-69.
- N34. A.S. Turabi, P. Lazpita, m. Sasmaz, H.E. Karaca, V.A. Cernenko, J.of Phys.D: Appl. Phys. 49 (2016) 205002
- N35. Y. Sutou, Y. Imano, N. Koeda, et al., Appl. Phys. Lett., 85 (2004): 4358-4360.
- N36. R. Kainuma, Y. Imano, W. Ito, et al., Nature, 2006, 439 (7079): 957-960.
- N37. I. Dubenko et al. J. of Mag Mag. Mat 321 (2009) 754–757.
- N38. M.Valeanu, G.Filoti, V.Kuncser, F.Tolea, B.Popescu, et al., JMMM 320 (2008) e164-e167
- N39. M. Sofronie, F.Tolea, V.Kuncser, M.Valeanu, J. Appl. Phys. 107 (2010) 113905.
- N40. V. K. Sharma, M. K. Chattopadhyay, K. H. B. Shaeb, et al., Appl. Phys. Lett., 89 (2006): 222509.
- N41. Samanta, A. U. Saleheen, D. L. Lepkowski, et al., Phys. Rev. B, 90 (2014): 064412.
- N42. F.Tolea, M. Tolea, M. Sofronie, B. Popescu, A. Crisan, A. Leca, M. Valeanu, IEEE TRANS. on MAG.53 (2017) 4400307.
- N43. S. Singh, L. Caron, S. W. D'Souza, et al., Adv. Mater., 28 (2016): 3321-3325.
- N44. J. Liu, T. Gottschall, K. P. Skokov, et al., Nat. Mater., 11 (2012): 620-626.
- N45. F. Tolea, M. Sofronie, AD. Crisan, M. Enculescu, V. Kuncser, M. Valeanu, J. of All. Comp. 650 (2015) 664-670.
- N46. M. Baibarac, A. Nila, I. Baltog, S. Lefrant; J. Y. Mevellec, S. Quillard, B. Humbert, European Polymer Journal 2017, 88 109-125
- N47. E. Bauer et.al. Eur. Phys. J. B 14, (2000) 483-493;
- N48. E. Bauer et.al. Phys. B 312-313 (2002) 840-842;
- N49. R. L. Orban, M. Lucaci, N. Jumate, D. Salomie, “Mechano-synthesis of nanocrystalline FeTi-Al-Ni intermetallic alloy for hydrogen storage”, Mat. Sci. Forum 672 (2011) 183-186
- N50. S. Couillaud, E. Gaudin, F. Weill, S. Gomez, C. Stan, D. Plante, S. Miraglia, J. L. Bobet, “Structure of a new ternary compound with high magnesium content, so-called Gd₁₃Ni₉Mg₇₈”, Acta Materialia 60(10) (2012) 4144-4151
- N51. G. Blanita, M. Streza, M. D. Lazar, D. Lupu, “Kinetics of hydrogen adsorption in MIL-101 single pellets”, Int. J. Hydrogen Energ. 42(5) (2017) 3064-3077
- N52. I. Iordache, D. Schitea, A. V. Gheorghe, M. Iordache, “Hydrogen underground storage in Romania, potential directions of development, stakeholders and general aspects”, Int. J. Hydrogen Energ. 39(21) (2014) 11071-11081
- N53. P. Palade, G. A. Lungu, A. M. Husanu, “Thermodynamic destabilization of Li-N-H system by Si addition”, J. Alloy Compd. 505(1) (2010) 343-347
- N54. C. Comanescu, G. Capurso, A. Maddalena, “Nanoconfinement in activated mesoporous carbon of calcium borohydride for improved reversible hydrogen storage”, Nanotechnology 23(38) (2012) article no. 385401
- N55. P. Palade, C. Comanescu, I. Mercioniu, “Improvements of hydrogen desorption of lithium borohydride by impregnation onto MSU-H carbon replica”, J. Ovonic Res. 8(6) (2012) 155-160
- N56. C. Palade, A.M. Lepadatu, A. Slav, S. Lazanu, V.S. Teodorescu, T. Stoica, M.L. Ciurea, Appl. Surf. Sci. 428 (2018) 698;
- N57. A.M. Lepadatu, C. Palade, A. Slav, A.V. Maraloiu, S. Lazanu, T. Stoica, C. Logofatu, V.S. Teodorescu, M.L. Ciurea, Nanotechnology 28 (2017) 175707;

- N58. I. Stavarache et al., *Semicond. Sci. Technol.* 32 (2017) 105003;
 N59. A. Slav, C. Palade, A.M. Lepadatu, M.L. Ciurea, V.S. Teodorescu, S. Lazanu, A.V. Maraloiu, C. Logofatu, M. Braic, A. Kiss, *Scripta Mater.* 113 (2016) 135;
 N60. I. Stavarache et al., *Beilstein J. Nanotechnol.* 7 (2016) 1492
 N61. G. Rogl *et.al.* *J. Alloy. Comp.* 695 (2017) 682-696;
 N62. A. Moure *et.al.* *Nano Energy* 31 (2017) 393–402;
 N63. Q. Zhang *et.al.* *Nano Energy* 41 (2017) 501–510.
 N64. R. Owarzany, P. J. Leszczynski, K. J. Fijalkowski, W. Grochala, “Mono- and bimetallic amidoboranes”, *Crystals* 6(8) (2016) article no. 88
 N65. T. K. Nielsen, M. Polanski, D. Zasada, P. Javadian, F. Besenbacher, J. Bystrzycki, J. Skibsted, T. R. Jensen, “Improved hydrogen storage kinetics of nanoconfined NaAlH₄ catalyzed with TiCl₃ nanoparticles”, *ACS Nano* 5(5) (2011) 4056-4064.
 N66. J. Manna, S. Akbayrak, S. Ozkar, “Nickel(0) nanoparticles supported on bare or coated cobalt ferrite as highly, magnetically isolable and reusable catalyst for hydrolytic dehydrogenation of ammonia borane”, *J. Colloid Interf. Sci.* 508(15) (2017) 359-368.
 N67. M. Yang, K. Stappert, A.-V. Mudring, *J. Mater. Chem. C*, 2014, 2, 458-473
 N68. T. Zhou, A. Llizo, P. Li, C. Wang, Y. Guo, M. Ao, L. Bai, C. Wang, Y. Yang, G. Xu, *J. Phys. Chem. C*, 2013, 117, 26573–26581.
 N69. M. Rodrigues, A. C. Calpena, D. B. Amabilino, M. L. Garduño-Ramírez, L. Pérez-García, *J. Mater. Chem. B*, 2014, 2, 5419-5429.
 N70. O. Crisan, A.D. Crisan, I. Mercioniu, D. Pantelica, F. Vasiliu, *Intermetallics* 65 (2015) 81-87
 N71. O. Crisan, A.D. Crisan, I. Mercioniu, R. Nicula, F. Vasiliu, *J. Magn. Mater.* 401 (2016) 711-715
 N72. O. Crisan, F. Vasiliu, P. Palade, I. Mercioniu, *J. Magn. Mater.* 401 (2016) 965-968
 N73. <https://www.energy.gov/epa/initiatives/department-energy-s-critical-materials-strategy>
 N74. <https://arpa-e.energy.gov/?q=slick-sheet-project/high-energy-composite-permanent-magnets>

Referinte-Tema 3

- [1] P. Pouponneau, O. Savadogo, T. Napporn, L. Yahia, S. Martel, *J Mater Sci: Mater Med* **22**, 237, (2011).
 [2] D. S. Levi, N. Kusnezov, G. P. Carman, *Pediatric Research*, **63(5)**, 552, (2008).
 [3] U. Allenstein, Y. Ma, A. A. Hashemi, M. Zink, S.G. Mayr, *Acta Biomater.* **9**, 5845,(2013).
 [4] M. Sofronie, F. Tolea, V. Kuncser, M. Valeanu, G. Filoti, *IEEE Trans Mag*, 51, 2500404, (2015).
 [5] A.C. Popa, et al., *Int J Nanomedicine*, **12**, 683, (2017).
 [6] M. Irimia-Vladu, *Chem. Soc. Rev.* **43**, 588, (2014).
 [7] K. Teranishi, et al., *Plasma Sources Sci Technol* **18**, 045011, (2009).
 [8] S. Nettesheim, et al., *Relyon Plasma Application Note*.
 [9] F.G. O’Brien, *Mater. Today* **14**, 88, (2011).
 [10] S. Eqtesadi, et al., *J. Eur. Ceram. Soc.* **34**, 107, (2017).
 [11] M. J. Oviedo, O. E. Contreras, Y. Rosenstein, R. Vazquez-Duhalt, Z. S. Macedo, G. G. Carbajal-Arizaga, G. A. Hirata, *J. Nanomaterials*, 9782625,(2016).
 [12] R.A. Surmenev, *Surf. Coat. Technol.* **206**, 2035, (2012).
 [13] J.R. Jones, *Acta Biomater.* **9**, 4457, (2013).
 [14] F.G. O’Brien, *Mater. Today* **14**, 188, (2011).
 [15] S. Eqtesadi, A. Motealleh, P. Miranda, A. Pajares, A. Lemos, J.M.F. Ferreira, *J. Eur. Ceram. Soc.* **34**, 107, (2017).
 [16] S.C. Cox, J.A. Thornby, G.J. Gibbons, M.A. Williams, K.K. Mallick, *Mater. Sci. Eng. C* **47**, 237, (2015).
 [17] S.I. Roohani-Esfahani, P. Newman, H. Zreiqat, *Sci. Rep.* **6**, 19468, (2016).
 [18] X. Qi, P. Pei, M. Zhu, X. Du, C. Xin, S. Zhao, X. Li, Y. Zhu, *Sci. Rep.* **7**, 42556, (2017).
 [19] L. Hench, J. Polak, *Science* **295**, 1014, (2002).
 [20] M. Mucalo, *Woodhead Publishing*, (2015).
 [21] F. Baine, E. Verné, *Biomed Glass* **3**, 1, (2017).
 [22] S.B. Goodman, Z. Yao, M. Keeney, F. Yang, *Biomaterials* **34**, 3174, (2013).
 [23] D.S. Brauer, *John Wiley & Sons*, (2012).

- [24] B.W. Stuart, M. Gimeno-Fabra, J. Segal, I. Ahmed, D.M. Grant, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **7**, 27362, (2015).
- [25] <https://www.nature.com/news/who-warns-against-post-antibiotic-era-1.15135>
- [26] A. V. Carazo, *Actuators*, (2016).
- [27] K. Teranishi et al, *Plasma Sources Sci. Technol.* **18**, 045011, (2009).
- [28] S. Nettesheim, D. Burgera, M. Szulcb, W. Falkc, G. Riess, *Relyon Plasma App. Note*
- [29] A. Ito, M. Shinkai, H. Honda, T. Kobayashi, *J Biosci. Bioeng.*, **100**, 1, (2005).
- [30] M. Shinkai, *J Biosci. Bioeng.*, **94(6)**, 606, (2002.)
- [31] O.M. Koo, I. Rubinstein, H. Onyuksel, *Nanomedicine: Nanotechnology, Biology and Medicine*, **1 (3)**, 193, (2005).
- [32] L.Y. Li et al., *Int. J. Radiation Oncology Biology Physics*, **58 (4)**, 1215 (2004).
- [33] A. Ito et al., *J. of Bioscience and Bioengineering*, **100 (1)**, 1, (2005).
- [34] F. Sonvico, S. Mornet, S. Vasseur, C. Dubernet, D. Jaillard, J. Degrouard, J. Hoebeke, E., Duguet, P. Colombo, P. Couvreur, *Bioconjugate Chemistry*. **16 (5)**, 1181, (2005).
- [35] A.H. Lu, E.L. Salabas, F. Schuth, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **46**, 1222, (2007).
- [36] Q. Dong, H. Su, F. Song, D. Zhang, N. Wang, *J. Am. Ceram. Soc.* **90**, 376, (2007).
- [37] M. Baláz, *Acta Biomater.*, **10**, 3827, (2014).
- [38] A. Janotti, C. G. Van de Walle, *Rep. Prog. Phys.*, **72**, 126501, (2009).
- [39] S.M. Lee, G. Grass, G.M. Kim, C. Dresbach, L. Zhang, U. Gosele, M. Knez, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **11**, 3608, (2009).
- [40] T. J. Wood, G. A. Hurst, W. C. E. Schofield, R. L. Thompson, G. Oswald, J. S. O. Evans, G. J. Sharples, C. Pearson, M. C. Petty, J. P. S. Badyal, *J. Mater. Chem.* **22**, 3859, (2012).
- [41] M. Ward, P. Baker, E. Iwuoha, P.H. Aubert, C. Plesse, *Mini-Rev. Org. Chem.*, **12**, 414, (2015).
- [42] H. Okuzaki, T. Kuwabara, K. Funasaka, T. Saido, *Adv. Funct. Mater.*, **23**, 4400, (2013).
- [43] T. F. Otero, J. Schumacher, V. H. Pascual, *RSC Adv.*, **6**, 68538, (2016).
- [44] M. Fuchiwaki, J. G. Martinez, T.F. Otero, *Adv. Funct. Mater.*, **25**, 1535, (2015).
- [45] J. J. Alcaraz-Espinoza, C. Pinto de Melo, H. P. de Oliveira, *ACS Omega*, **2**, 2866, (2017).
- [46] Q. Tang, J. Wu, Z. Tang, Y. Li, J. Lin, M. Huang, *J. Mater. Chem.* **21**, 13354, (2011).
- [47] C. Jayaseelan, A. Abdul Rahuman, A. Vishnu Kirthi, S. Marimuthu, T. Santhoshkumar A. Bagavan, et al., *Spectrochim Acta, A* **90**, 78, (2012).
- [47] S. Patra, S. Mukherjee, A.K. Barui, A. Ganguly, B. Sreedhar, C.R. Patra, *Mater. Sci. Eng. C* **53**, 298, (2015).
- [48] M.E. Barbinta-Patrascu, C. Ungureanu, S.M. Iordache, I.R. Bunghez, N. Badea, I. Rau, *J. Mater. Chem. B*, **2**, 3221, (2014).
- [49] M.E. Barbinta-Patrascu, N. Badea, C. Ungureanu, M. Constantin, C. Pirvu, I. Rau, *Optical Materials* **56**, 94, (2016).
- [50] F. O. Ortmann, K. Hannewald, F. Bechstedt, *J. Phys. Chem. B* **113**, 7367 (2009).
- [51] K. Sarveswaran, W. Hu, P. W. Huber, G. H. Bernstein, M. Lieberman, *Langmuir* **22**, 11279 (2006).
- [52] E. Sarantopoulou, Z. Kollia, A. C. Cefalas, Z. Samardžija, S. Kobe, *Thin Solid Films* **495**, 45 (2006).
- [53] F. Palmero, J. F. R. Archilla, D. Hennig, F. R. Romero, *New J. Phys.* **6**, 13 (2004).
- [54] E. W. Schlag, D.Y. Yang, S.Y. Sheu, H. L. Selzle, S. H. Lin, P. M. Rentzepis, *PNAS* **97**, 9849 (2000).
- [55] V. Nelea, C. Morosanu, M. Iliescu, I.N. Mihailescu, *Surf. Coat. Technol.* **173**, 315, (2003).
- [56] L. Verestiuc, C. Morosanu, M. Bercu, I. Pasuk, I.N. Mihailescu, *J. Cryst. Growth* **264** 483, (2004).
- [57] V. Nelea, C. Morosanu, M. Iliescu, I.N. Mihailescu, *Appl. Surf. Sci.* **228**, 346, (2004).
- [58] L.E. Sima, G.E. Stan, C.O. Morosanu, A. Melinescu, A. Ianculescu, R. Melinte, J. Neamtu, S.M. Petrescu, *J. Biomed. Mater. Res. A* **95**, 1203, (2010).
- [59] A. Chiriac, L. Duta, A. Ianculescu, I.N. Mihailescu, M. Miroiu, S. Petrescu, A.C. Popescu, I. Poeata, G. Socol, F. Sima, G. Stan; *Brevet OSIM 128190/ BOPI nr. 4/2014*
- [60] G.E. Stan. C.O. Morosanu, D.A. Marcov, I. Pasuk, F. Miculescu, G. Reumont, *Appl. Surf. Sci.* **255**, 9132 (2009).
- [61] A.C. Popa, V.M.F. Marques, G.E. Stan, M.A. Husanu, A.C. Galca, C. Ghica, D.U. Tulyaganov, A.F. Lemos, J.M.F. Ferreira, *Thin Solid Films* **553**, 166, (2014).
- [62] A.C. Popa, G.E. Stan, M. Enculescu, C. Tanase, D.U. Tulyaganov, J.M.F. Ferreira, *J. Mech. Behav. Biomed. Mater.* **51**, 313 (2015).

- [63] T. Popescu, A.R. Lupu, V. Raditoiu, V. Purcar, V.S. Teodorescu, *J. of Colloid and Interface Science* **457**, 108, (2015).
- [64] A.R. Lupu, T Popescu, *Toxicology in vitro*, **27(5)**, 1445, (2013).
- [65] T. Popescu, A-R. Lupu, L. Diamandescu, D. Tarabasanu- Mihaila, V.S. Teodorescu, V. Raditoiu, V. Purcar, A.M. Vlaicu, *Journal of Nanoparticle Research*, **15**, 1449, (2013).
- [66] N. Yu, F. Capasso, *Nature Materials* **13**, 139, (2014).
- [67] H. Liu, B. Wang, E. S. P. Leong., J. Teng, S. A. Maier, *ACS Nano* **4**, 3139, (2010).
- [68] S. Shui Yee Leung, A. Chong Ming Chiow, A. Ukkonen, H.K. Chan, *Pharm. Res.* **33**, 283, (2016).
- [69] J. Wong, Y.W. Lin, P. Chi Lip Kwok, V. Niemelä, J. Crapper, H.K. Chan, *Mol. Pharm.* **12**, 3433, (2015).
- [70] J. Wong, Y.W. Lin, P. Chi Lip Kwok, V. Niemelä, D. Heng, J. Crapper, H. K. Chan, *J. Aerosol Sci.* **95**, 104, (2016).
- [71] M. Rai, A. Yadav, A. Gade, *Biotechnol. Advances*, **27 (7)**, 83, (2009).
- [72] J. R. Morones, J. L. Elechiguerra, A. Camacho, J. T. Ramirez, *Nanotechnol.* **1**, 2346, (2005).
- [73] J. S. Kim, E. Kulk, K. N. Yu, J. H. Kim, S. J. Park, H. J. Lee et al., *Nanomed Nantechnol Biol Med.*, **3**, 95, (2007).
- [74] H. J. Klasen. *Early uses. Burns.*, **26**, 117, (2000).
- [75] S. Silver, L. T. Phung, *Annu. Rev. Microbiol.* **50**, 753, (1996).
- [76] R. M. Slawson, M. I. Van Dyke, H. Lee and J. T. Trevors, *Plasmid.*, **27**, 72, (1992).
- [77] A. Uchida, S.M.L. Nade, E.R. McCartney, et al., *J Bone Joint Surg Br.*, **66**, 269, (1984).
- [78] M. Schierholz, C. Morszeck, N. Brenner, D.P. Konig, N. Yucel, M. Korenkov, et al. *Orthopade.*, **33(4)**, 397, (2004).
- [79] H. Belt, D. Neut, W. Schenk, J. Horn, H. Mei, H.J. Busscher, *Acta Orthop Scand.*, **72(6)**, 557, (2001).
- [80] K. Garvin, C. Feschuk, *Clin Orthop Relat Res.*, **437**, 105, (2005).
- [81] L. Harris, R. Richards, *Injury*, **37**, S3, (2006).
- [82] L. Braydich-Stolle et al., *Toxicological Sciences*, **88(2)**, 412, (2005).
- [83] J.R. Morones et al., *Nanotechnology*, **16**, 2346, (2005).
- [84] K. Li, Y.Xie, H. Ao, L. Huang, H. Ji, X. Zheng, *Ceram. Int.*, **39**, 7895, (2013).
- [85] R.O.Darouiche, N. Engl., *J. Med.*, 350, 1422, (2004).
- [86] E.M. Hetrick, M.H. Schoenfisch, *Chem. Soc. Rev.*, **35**, 780, (2006).
- [87] S. Samani, S.M. Hossainipour, M.. Tamizifar, H.R. Rezaie, *J. Biomed. Mater. Res. A*, **101A**, 222, (2013).
- [88] Y.Z. Wan, S. Raman, F. He, Y. Huang, *Vacuum*, **81**, 1114, (2007).
- [89] M. Millar, *Surfaces and Interfaces for Biomaterials*; Vadgama, P., Ed.; CRC Press: Boca Raton, FL, USA, 619, (2005).
- [90] J.M. Higashi, R.E. Marchant, *Handbook of Biomaterials Evaluation*, Scientific, Technical and Clinical Testing of Implant Materials; von Recum, A.F., Ed.; Taylor & Francis: Philadelphia, PA, USA, 493, (1998).
- [91] C.S. Ciobanu, C.L. Popa, D. Predoi, *J. Nanomater.* **1**, (2014).
- [92] C.L. Popa, C.S. Ciobanu, *Rom. Rep. Phys.*, **68**, 1170, (2016).
- [93] E. Vernè, S.D. Nunzio, M. Bosetti, P. Appendino, C.V. Brovarone, G. Maina, M. Cannas, *Biomaterials*, **26**, 5111, (2005).
- [94] J. Huang, S.M. Best, W. Bonfield, R.A. Brooks, N. Rushton, S.N. Jayasinghe, M.J. Edirisinghe, *J. Mater. Sci. Mater. Med.*, **15**, 441, (2004).
- [95] N.Iqbal, M. Rafiq, A. Kadir, N.H. Mahmood, N. Salim, G.R.A Froemming, H.R.; Balaji, T. Kamarul, *Ceram. Int.*, **40**, 4507, (2014).
- [96] F. Bir, H. Khireddine, A. Touati, D. Sidane, S. Yala, H. Oudadesse, *Appl. Surf. Sci.*, **258**, 7021, (2012).
- [97] A. Bandyopadhyay, S. Bernard, W.Xue, S. Bose, *J. Am. Ceram. Soc.* **89**, 2675, (2006).
- [98] Li, K.; Yu, J.M.; Xie, Y.T.; Huang, L.P.; Ye, X.J.; Zheng, X.B., *J. Mater. Sci. Mater. Med.*, **22**, 2781, (2011).
- [99] D. Predoi, S.L. Iconaru, A. Deniaud, M. Chevallet, I. Michaud-Soret, N. Buton, A.M., Prodan, *Materials*, **10**, 229, (2017).
- [100] C.L. Popa, A. Deniaud, I. Michaud-Soret, R. Guégan, M. Motelica-Heino, D. Predoi, *J. Nanomater.* **2016**, 1, (2016).

- [101] C.L. Romanò, N. Logoluso, L. Drago, *Operative Medical Management for Total Joint Arthroplasty*. Switzerland: Springer International Publishing; 269 (2014).
- [102] J. Gallo, M. Holinka, C.S. Moucha, *Int J Mol Sci.* **15**(8), 13849, (2014).
- [103] Y. Ma, M. Zink, and S. G. Mayr, *Appl. Phys. Lett.* **96**, 213703 (2010).
- [104] R.A. Surmenev, M.A. Surmeneva, A.A. Ivanova, *Acta Biomater.* **10** 557, (2014).
- [105] P. Aggarwal, J.B., Hall, C.B. McLeland, M.A. Dobrovolskaia, S.E. McNeil, *Adv Drug Deliv Rev.* **61**, 428, (2009).
- [106] M. Rahman, S. Laurent, N. Tawil, L. Yahia, M. Mahmoudi, *Protein-Nanoparticle interactions. The Bio-Nano Interface*. Springer, ISBN: 978-3-642-37554-5 (2013).
- [107] D. Simberg, J.H. Park, P.P. Karmali, W.M. Zhang, S. Merkulov, K. McCrae, S.N. Bhatia, M. Sailor, E. Rouslahti, *Biomaterials.* **30**, 3926, (2009).
- [108] S. Yamaguchi, H. Kobayashi, T. Narita, K. Kanehira, S. Sonezaki, Y. Kubota, S. Terasaka, Y. Iwasaki, *Photochem Photobiol.*, **86**(4), 964, (2010).
- [109] A. Á. Ramírez-Santos, P. Acevedo-Peña, E.M. Córdoba, *Quím. Nova* **35** (10), São Paulo (2012).
- [110] T. Kitamura, H. Kumazawa, *Chemical Engineering Communications*, **192**(6), (2005).
- [111] S. Rahim M. Sasani Ghamsari S. Radiman, *Scientia Iranica*, **19**(3), 948, (2012).
- [112] M. Irimia-Vladu, P. A. Throssin, M. Reisinger, G. Schwabegger, M. Ullah, R. Schwoediauer, A. Mumyatov, M. Bodea, J. W. Fergus, V. F. Razumov, H. Sitter, S. Bauer, N. S. Sariciftci, *Org. Electron.* **11**, 1974 (2010).

Referinte –Tema 4

- [pint1] C. Besleaga, L. E. Abramiuc, V. Stancu, A. G. Tomulescu, M. Sima, L. Trinca, N. Plugaru, L. Pintilie, G. A. Nemnes, M. Iliescu, H. G. Svavarsson, A. Manolescu, and Ioana Pintilie, *J. Phys. Chem. Lett.* **7**, 5168-5175 (2016).
- [pint2] G. A. Nemnes, C. Besleaga, A. G. Tomulescu, I. Pintilie, L. Pintilie, K. Torfason, and A. Manolescu, *Solar En. Mater. Solar Cells* **159**, 197-203 (2017).
- [pint3] G. A. Nemnes, C. Besleaga, V. Stancu, D. E. Dogaru, L. N. Leonat, L. Pintilie, K. Torfason, M. Ilkov, A. Manolescu, and I. Pintilie, *J. Phys. Chem. C* **121**, 11207-11214 (2017).
- [adel1] A. Stanoiu, S. Somacescu, J. M. Calderon-Moreno, V. S. Teodorescu, O. G. Florea, A. Sackmann, and C. E. Simion, *Sens. Actuat. B – Chem.* **231**, 166-174 (2016).
- [adel2] A. Stanoiu, C. E. Simion, J. M. Calderon-Moreno, P. Osiceanu, M. Florea, V. S. Teodorescu, and S. Somacescu, *J. Hazard. Mater.* **331**, 150-160 (2017).
- [bars1] N. Barsan, D. Koziej and U. Weimar, *Sens. Actuat. B – Chem.* **121**, 18-35 (2007).
- [grig1] I. Porosnicu, D. Avram, B. Cojocar, M. Florea, and C. Tiseanu, *J. Alloys Compds.* **711**, 627-636 (2017).
- [grig2] D. Avram, B. Cojocar, I. Tiseanu, M. Florea, and C. Tiseanu, *J. Phys. Chem. C.* **121**, 14274-14284 (2017).
- [grig3] T. Trupke, M. A. Green and P. Würfel, *J. Appl. Phys.* **92**, 1668-1674 (2002).
- [grig4] T. Trupke, M. A. Green and P. Würfel, *J. Appl. Phys.* **92**, 4117-4122 (2002).
- [grig5] W. van Sark, J. de Wild, J. K. Rath, A. Meijerink, and R. E. Schropp, *Nanoscale Res. Lett.* **8**, 81(1-10) (2013).
- [grig6] S. Fischer, a), J. C. Goldschmidt, P. Löper, G. H. Bauer, R. Brüggemann, K. Krämer, D. Biner, M. Hermle, and S. W. Glunz, *J. Appl. Phys.* **108**, 044912(1-11) (2010).
- [grig7] C. Strümpel, M. McCann, G. Beaucarne, V. Arkhipov, A. Slaoui, V. Švrček, C. del Cañizo, and I. Tobias, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **91**, 238-249 (2007).
- [grig8] L. E. Cates, S. L. Chinnapongse, J.-H. Kim, and J.-H. Kim, *Environ. Sci. Technol.* **46**, 12316-12328 (2012).
- [negr1] H. W. Hillhouse and M. C. Beard, *Curr. Opin. Colloid. In.* **14**, 245–259 (2009).
- [negr2] O. E. Semonin, J. M. Luther and M. C. Beard, *Mater. Today* **15**, 508-515 (2012).
- [negr3] D. Zhitomirsky, O. Voznyy, L. Levina, S. Hoogland, K. W. Kemp, A. H. Ip, S. M. Thon, and E. H. Sargent, *Nat. Commun.* **5**, 3803(1-7) (2014).
- [negr4] V. Mlinar, *Nanotechnology* **24**, 042001(1-11) (2013).
- [negr5] C-H. M. Chuang, P. R. Brown, V. Bulovic, and M. G. Bawendi, *Nat. Mater.* **13**, 796–801 (2014).

- [leon1] M. A. Green, Y. Hishikawa, W. Warta, E. D. Dunlop, D. H. Levi, J. Hohl-Ebinger, A. W. Y. Ho-Baillie, *Progr. Photovoltaics* **25**, 668–676 (2017).
- [leon3] J. Burschka, N. Pellet, S.-J. Moon, R. Humphry-Baker, P. Gao, M. K. Nazeeruddin, and M. Grätzel *Nature* **499**, 316–319 (2013).
- [leon4] G. Choudalakis and A. D. Gotsis, *Eur. Polym. J.* **45**, 967-984 (2009).
- [raso1] F. Stanculescu, O. Rasoga, A. M. Catargiu, L. Vacareanu, M. Socol, C. Breazu, N. Preda, G. Socol, and A. Stanculescu, *Appl. Surf. Sci.* **336**, 240-248 (2015).
- [raso2] N. S. Sariciftci, L. Smilowitz, A. J. Heeger, and F. Wudl, *Science* **258** 1474-1476 (1992).
- [raso3] M. C. Scharber and N. S. Sariciftci, *Prog. Polym. Sci.* **38**, 1929-1940 (2013).
- [raso4] N. Yeh and P. Yeh, *Renewable and Sustainable Energy Reviews* **21**, 421-431 (2013).
- [raso5] L. M. Chen, Z. Hong, G. Li, Y. Yang, *Adv. Mater.* **21**, 1434-1449 (2009).
- [raso6] B. P. Rand, C. Girotto, A. Mityashin, A. Hadipour, J. Genoe, and P. Heremans, *Appl. Phys. Lett.* **95**, 173304(1-3) (2009).
- [raso7] P. E. Schwenn, K. Gui, A. M. Nardes, K. B. Krueger, K. H. Lee, K. Mutkins, H. Rubinstein-Dunlop, P. E. Shaw, N. Kopidakis, P. L. Burn, and P. Meredith, *Adv. Energy Mater.* **1**, 73-81 (2011).
- [raso8] A. J. Heeger, *Adv. Mater.* **26**, 10-28 (2014).
- [raso10] G. Dennler, M. C. Scharber and C. J. Brabec, *Adv. Mater.* **21**, 1323-1338 (2009).
- [raso11] A. Stanculescu, G. Socol, M. Grigoras, T. Ivan, L. Vacareanu, M. Socol, O. Rasoga, C. Breazu, I. N. Mihailescu, I. Iordache, N. Preda, and F. Stanculescu, *Appl. Phys. A* **117**, 261-268 (2014).
- [raso12] A. Stanculescu, G. Socol, L. Vacareanu, M. Socol, O. Rasoga, C. Breazu, M. Girtan, and F. Stanculescu, *Appl. Surf. Sci.* **374**, 278-289 (2016).
- [raso13] A. Stanculescu, O. Rasoga, M. Socol, L. Vacareanu, M. Grigoras, G. Socol, F. Stanculescu, C. Breazu, E. Matei, N. Preda, and M. Girtan *Appl. Surf. Sci.* **417**, 183-195 (2017).
- [raso14] F. Stanculescu, A. Stanculescu, M. Girtan, M. Socol, and O. Rasoga, *Synthetic Metals* **161**, 2589-2597 (2012).
- [raso15] F. Stanculescu and A. Stanculescu, *Nanoscale Res. Lett.* **11**:87(1-13) (2016).
- [raso16] J. Nelson, *Mater. Today* **14**, 462-470 (2011).
- [soco1] <http://www.heliatek.com/en/press/press-releases/details/heliatek-sets-new-organic-photovoltaic-world-record-efficiency-of-13-2>.
- [soco2] R. Sharma, S. Bhalerao and D. Gupta, *Org. Electron.* **33**, 274-280 (2016).
- [soco3] S. Oh, T. Nagata, J. Volk, and Y. Wakayama, *J. Appl. Phys.* **113**, 083708(1-7) 2013.
- [soco4] S. J. Moon, E. Baranoff, S. M. Zakeeruddin, C. Y. Yeh, E. W. G. Diau, M. Gratzel, and K. Sivula, *Chem. Commun.* **47**, 8244-8246 (2011).
- [soco5] S. Kwon, H. C. Moon, K. G. Lim, D. Bae, S. Jang, J. Shin, J. Park, T. W. Lee, and J. K. Kim, *J. Mater. Chem. A* **1**, 2401-2405 (2013).
- [soco6] Z. X. Fan, H. Zhang, W. L. Yu, Z. Y. Xing, H. T. Wei, Q. F. Dong, W. J. Tian, and B. Yang, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **3**, 2919-2923 (2011).
- [soco7] R. Liu, *Materials* **7**, 2747-277 (2014).
- [soco8] A. Stanculescu, O. Rasoga, M. Socol, L. Vacareanu, M. Grigoras, G. Socol, F. Stanculescu, C. Breazu, E. Matei, N. Preda, and M. Girtan, *Appl. Surf. Sci.* **417**, 183-195, (2017).
- [soco9] M Socol, N. Preda, A. Stanculescu, C. Breazu, C. Florica, F. Stanculescu, S. Iftimie, M. Girtan, G. Popescu-Pelin, and G. Socol, *Appl. Surf. Sci.* **417**, 196-203 (2017).
- [soco10] M. Socol, N. Preda, O. Rasoga, C. Breazu, I. Stavarache, F. Stanculescu, G. Socol, F. Gherendi, V. Grumezescu, N. Stefan, and M Girtan, *Appl. Surf. Sci.* **374**, 403-410 (2016).
- [soco11] W. Ge, A. Atewologun and A. D. Stiff-Roberts, *Org. Electron.* **22**, 98-107 (2015).
- [soco12] R. Pate, A. D. Stiff-Roberts and K. R. Lantz, *Thin Solid Films* **517**, 6798-6802 (2009).
- [ccio1] T. B. Fleetham, Z. Wang and J. Li, *Inorg. Chem.* **52**, 733-73438 (2013).
- [ccio2] X. Qin, Z. Zhao, Y. Wang, J. Wu, Q. Jiang, J. You, *J. Semicond.* **38**, 011002(1-9) (2017).
- [ccio3] I. C. Ciobotaru, S. Polosan and C. C. Ciobotaru, *J. Luminescence* **145**, 259-262 (2014).
- [ccio4] C. C. Ciobotaru, C. M. Damian, S. Polosan, M. Prodana, and H. Iovu, *Dig. J. Nanomater. Biostruct.* **9**, 859-868 (2014).
- [ccio5] C. M. Damian, S. A. Garea, E. Vasile, and H. Iovu, *Composites: Part B* **43**, 3507-3515 (2012).
- [ccio6] M. Z. H. Khan, M. R. Al-Mamun, P. K. Halder, and M. A. Aziz, *Renew. Sustain. En. Rev.* **71**, 602-617 (2017).
- [flor1] S. Chu and A. Majumdar, *Nature* **488**, 294-303 (2012).

- [flor2] L. Carrette, K. A. Friedrich and U. Stimming, *Fuel Cells* **1**, 5-39 (2001).
- [flor3] N. S. Lewis and D. G. Nocera, *PNAS* **103**, 15729-15735 (2006).
- [flor4] J. Suntivich, H. A. Gasteiger, N. Yabuuchi, H. Nakanishi, J. B. Goodenough, and Y. Shao-Horn, *Nat. Chem.* **3**, 546-550 (2011).
- [flor5] F. Cheng and J. Chen, *Chem. Soc. Rev.* **41**, 2172-2192 (2012).
- [flor6] M. K. Debbé, *Nature* **486**, 43-51 (2012).
- [flor7] E. Fabbri, A. Habereeder, K. Waltar, R. Kotz, and T. J. Schmidt, *Catal. Sci. Technol.* **4**, 3800-3821 (2014).
- [flor8] Q. Yin, J. M. Tan, C. Besson, Y. V. Geletti, D. G. Musaev, A. E. Kuznetsov, Z. Luo, K. I. Hardcastle, and C. L. Hill, *Science* **328**, 342-345 (2010).
- [flor9] J. Rossmeisl, Z. W. Qu, H. Zhu, G. J. Kroes, and J. K. Nørskov, *J. Electroanal. Chem.* **607**, 83-89 (2007).
- [flor10] L. Chen, X. Dong, Y. G. Wang, and Y. Y. Xia, *Nat. Commun.* **7**, 11741(1-8) (2016).
- [flor11] C. Tang, N. Y. Cheng, Z. H. Pu, W. Xing, and X. P. Sun, *Angew. Chem. Int. Ed.* **54**, 9351-9355 (2015).
- [flor12] C. Tang, A. M. Asiri and X. P. Sun, *Chem. Commun.* **52**, 4529-4532 (2016).
- [flor13] T. T. Liu, A. M. Asiri and X. P. Sun, *Nanoscale* **8**, 3911-3415 (2016).
- [neat1] S. Neațu, F. Neațu, M. Florea, L. E. Abramiuc, and C. M. Teodorescu, NiO-ZnO/TiO₂ composites for photocatalytic water splitting, under preparation.
- [neat2] X. B. Chen, S. H. Shen, L. J. Guo and S. S. Mao, *Chem. Rev.* **110**, 6503-6570 (2010).
- [neat3] Y. Tachibana, L. Vayssieres and J. R. Durrant, *Nat. Photon.* **6**, 511-518 (2012).
- [neat4] A. J. Bard, *J. Photochem.* **10**, 59-75 (1979).
- [neat5] S. Guo, S. Han, H. Mao, S. Dong, C. C. Wu, L. C. Jia, B. Chi, J. Pu, and J. Li, *J. Power Sources* **245**, 979-985 (2014).
- [neat6] M. T. Uddin, Y. Nicolas, C. Olivier, W. Jaegermann, N. Rockstroh, H. Junge, and T. Toupance, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19**, 19279-19288 (2017).
- [neat7] O. Khaselev and J. A. Turner, *Science* **280**, 425-427 (1998).
- [neat8] S. Y. Reece, J. A. Hamel, K. Sung, T. D. Jardi, A. J. Esswein, J. J. Pijpers, and D. G. Nocera, *Science* **334**, 645-648 (2011).
- [borc1] A. M. Lepadatu, C. Palade, A. Slav, A. V. Maraloiu, S. Lazanu, T. Stoica, C. Logofatu, V. S. Teodorescu, and M. L. Ciurea, *Nanotechnology* **28**, 175707(1-8) (2017).
- [borc2] A. Ghalem, M. Rammal, L. Huitema, A. Crunteanu, V. Madrangeas, P. Dutheil, F. Dumas-Bouchiat, P. Marchet, C. Champeaux, L. Trupina, L. Nedelcu, and M. G. Banciu, *Ieee Microwave and Wireless Components Letters* **26**, 504-506 (2016).
- [borc3] L. M. Hrib, L. Pintilie and M. Alexe. *Scientific Reports* **7**, 6563(1-9) (2017).
- [borc4] C. M. Teodorescu, L. Pintilie, N. G. Apostol, R. M. Costescu, G. A. Lungu, L. M. Hrib, L. Trupina, L. C. Tanase, I. C. Bucur, and A. E. Bocirnea. *Physical Review B* **96**, 115438(1-15) (2017).
- [borc5] L. C. Tanase, N. G. Apostol, L. E. Abramiuc, C. A. Tache, L. M. Hrib, L. Trupina, L. Pintilie, and C. M. Teodorescu, *Scientific Reports* **6**, 35301(1-18) (2016).
- [borc6] B. Borca, S. Barja, M. Garnica, D. Sánchez-Portal; V.M. Silkin, E.V. Chulkov, C.F. Hermanns, J.J. Hinarejos, A.L. Vázquez de Parga, A. Arnau, P.M. Echenique, and R. Miranda, *Physical Review Letters* **105**, 036804(1-4) (2010).
- [borc7] B. Borca, T. Michnowicz, R. Pétuya, M. Pristl, V. Schendel, I. Pentegov, U. Kraft, H. Klauk, P. Wahl, R. Gutzler, A. Arnau, U. Schlickum, and K. Kern, *ACS Nano* **11**, 4703- 4709 (2017).
- [borc8] R. Bouchet, S. Maria, R. Meziane, A. Aboulaich, L. Lienafa, J.-P. Bonnet, T. N. T. Phan, D. Bertin, D. Gigmes, D. Devaux, R. Denoyel, and M. Armand, *Nature Materials* **12**, 452-457 (2013).
- [borc9] N. Kamaya, K. Homma, Y. Yamakawa, M. Hirayama, R. Kanno, M. Yonemura, T. Kamiyama, Y. Kato, S. Hama, K. Kawamoto, and A. Mitsui, *Nature Materials* **10**, 682-686 (2011).
- [borc10] X. Han, Y. Gong, K. K. Fu, X. He, G.T. Hitz, J. Dai, A. Pearse, B. Liu, B., H. Wang, G. Rubloff, and Y. Mo, *Nature Materials* **16**, 572-579 (2017).
- [borc11] X. Han, Y. Liu, Z. Jia, Y. C. Chen, J. Wan, N. Weadock, K. J. Gaskell, T. Li, and L. Hu, *Nano Letters* **14**, 139-147 (2013).
- [borc12] M. H. Braga, N. S. Grundish, A. J. Murchisona, and J. B. Goodenough, *Energy Environ. Sci.* **10**, 331-336 (2017).
- [mara1] http://www.namr.ro/wp-content/uploads/2017/11/rep_statistics_type_comm.htm

- [mara2] G. De Giudici, F. Podda, R. Sanna, E. Musu, R. Tombolini, C. Cannas, A. Musinu, and M. Casu, *Am. Mineral.* **94**, 1698-1706 (2009).
- [mara3] P. Lattanzi, C. Meneghini, G. De Giudici, and F. Podda, *J. Hazard. Mater.* **177**, 1138-1144 (2010).
- [mara4] P. Lattanzi, C. Maurizio, C. Meneghini, G. De Giudici, and F. Podda, *Eur. J. Mineral.* **22**, 557-564 (2010).
- [mara5] D. Medas, G. De Giudici, F. Podda, C. Meneghini, and F. Lattanzi, *Geochim. Cosmochim. Ac.* **140**, 349-364 (2014).
- [mara6] D. Medas, P. Lattanzi, F. Podda, C. Meneghini, A. Trapananti, A. Sprocati, M. A. Casu, E. Musu, and G. De Giudici, *Environ. Sci. Pollut. R.* **21**, 6775-6782 (2014).
- [mara7] F. Podda, D. Medas, G. De Giudici, P. Ryszka, K. Wolowski, and K. Turnau, *Environ. Sci. Pollut. R.* **21**, 6793-6808 (2014).
- [mara8] A. Cherchi, C. Buosi, P. Zuddas, and G. De Giudici, *Biogeosciences* **9**, 4607-4620 (2012).
- [mara9] C. Buosi, A. Cherchi, P. Zuddas, and G. De Giudici, *Spanish Journal of Palaeontology* **29**, 71-82 (2014).
- [mara10] H. A. Lowenstam, *Science* **211**, 1126-1131 (1981).
- [mara11] F. Gaboyer, C. Le Milbeau, M. Bohmeier, P. Schwendner, P. Vannier, K. Beblo-Vranesevic, E. Rabbow, F. Foucher, P. Gautret, R. Guégan, A. Richard, A. Sauldubois, P. Richmann, A. K. Perras, C. Moissl-Eichinger, C. S. Cockell, P. Rettberg, Marteinsson, E. Monaghan, P. Ehrenfreund, L. Garcia-Descalzo, F. Gomez, M. Malki, R. Amils, P. Cabezas, N. Walter, and F. Westall, *Sci. Rep.* **7**, 8775 (2017).
- [bote1] T. Takenaka, K. Maruyama and K.I. Sakata, *Jpn. J. Appl. Phys.* **30**, 2236-2239 (1991).
- [bote2] S. T. Lau, C. H. Cheng, S. H. Choy, D. M. Lin, K. W. Kwok, and H. L. W. Chan, *J. Appl. Phys.* **103**, 104-105 (2008).
- [bote3] G. E. Stan, M. Botea, G. A. Boni, I. Pintilie, and L. Pintilie, *Appl. Surf. Sci.* **353**, 1195-1202 (2015).
- [bote4] M. Botea, A. Iuga and L. Pintilie, *Appl. Phys. Lett.* **103**, 232902(1-4) (2013).
- [bote5] W. Li, Z. Xu, R. Chu, J. Hao, P. Fu, J. Du, and Z. Yue, *J. Mater. Sci. Mater. Electron.* **27**, 8911-8915 (2016).
- [bote6] C. Dragoi, M. Cernea and L. Trupina, *Appl. Surf. Sci.* **257**, 9600-9605 (2011).
- [bote7] L. Pintilie, M. Botea and A. Iuga, *Appl. Phys. Lett.* **105**, 132901(1-4) (2014).
- [bote8] A. Ianculescu, I. Pintilie, C.A. Vasilescu, M. Botea, A. Iuga, A. Melinescu, N. Dragan, and L. Pintilie, *Ceram. Int.* **42**, 10338-10348 (2016).
- [sava1] M. Popescu, A. Lőrinczi, F. Sava, A. Velea, I. D. Simandan, P. Badica, M. Burdusel, A. C. Galca, G. Socol, F. Jipa, and M. Zamfirescu, *Mater. Lett.* **142**, 229-231 (2015).
- [sava2] M. Popescu, F. Sava, A. Lőrinczi, A. Velea, I. D. Simandan, P. Badica, M. Burdusel, A. C. Galca, E. Matei, N. Preda, M. Secu, G. Socol, F. Jipa, M. Zamfirescu, and A. Balan, *Semicond. Sci. Technol.* **30**, 044001(1-8) (2015).
- [sava3] M. Popescu, F. Sava, A. Lőrinczi, A. Velea, I.-D. Simandan, A. C. Galca, E. Matei, G. Socol, F. Gherendi, D. Savastru, and S. Miclos, *Phys. Stat. Solidi B* **253**, 1033-1037 (2016).
- [sava4] L. Calvez, *C. R. Phys.* **18**, 314-322 (2017).
- [sava5] M. Hubert, G. Delaizir, J. Monnier, C. Godart, H. L. Ma, X. H Zhang, and L. Calvez, *Opt. Express* **19**, 23513-23522 (2011).
- [slav1] H. Hussain, G. Tocci, T. Woolcot, X. Torrelles, C. L. Pang, D. S. Humphrey, C. M. Yim, D. C. Grinter, G. Cabailh, O. Bikondoa, R. Lindsay, J. Zegenhagen, A. Michaelides, and G. Thornton, *Nat. Mater.* **16**, 461-466 (2017).
- [slav2] S.A. Ansari, and M.H. Cho, *Sci. Rep.* **6**, 25405(1-10) (2016).
- [slav3] Y. Ding, X. Xia, W. Chen, L. Hu, L. Mo, Y. Huang, and S. Dai, *Nano Res.* **9**, 1891-1903 (2016).
- [slav4] S. F. Shaikh, R. S. Mane, B. K. Min, Y. J. Hwang, and O. Joo, *Sci. Rep.* **6**, 20103(1-10) (2016).
- [slav5] Y. Li, Q. Cai, L. Wang, Q. L, X. Peng, B. Gao, K. Huo, and P. K. Chu, *ACS Appl. Mater. Interf.* **8**, 23784-23792 (2016);
- [slav6] H. Wang, Q. Sun, Y. Yao, Y. Li, J. Wang, and L. Chn, *Ceram. Int.* **42**, 8565-8571 (2016).
- [slav7] V. G. Deepagan, D. G. You, W. Um, H. Ko, S. Kwon, K. Y. Choi, G. R. Yi, J. Y. Lee, D. S. Lee, K. Kim, I. C. Kwon, and J. H. Park, *Nano Lett.* **16**, 6257-6264 (2016).

- [slav8] C. P. Church, E. Muthuswamy, G. Zhai, S. M. Kauzlarich, and S. A. Carter, *Appl. Phys. Lett.* **103**, 223506 (2013).
- [slav9] L. Duta, C. Popescu, A. Popescu, M. Motoc, C. Logofatu, A. Enesca, A. Duta, and E. Gyorgy, *Appl. Phys. A - Mater. Sci. Process.* **117**, 97-101 (2014).
- [slav10] D. Negrea, C. Ducu, S. Moga, V. Malinovschi, C. J. A. Monty, B. Vasile, D. Dorobantu, and Marian Enachescu, *J. Nanosci. Nanotechnol.* **12**, 8746-8750 (2012).
- [slav11] A. Slav, C. Palade, A. M. Lepadatu, M. L. Ciurea, V. S. Teodorescu, S. Lazanu, A. V. Maraloiu, C. Logofatu, M. Braic, and A. Kiss, *Scripta Mater.* **113**, 135-138 (2016).
- [slav12] A. M. Lepadatu, C. Palade, A. Slav, A. V. Maraloiu, S. Lazanu, T. Stoica, C. Logofatu, V. S. Teodorescu, and M. L. Ciurea, *Nanotechnology* **28**, 175707(1-8) (2017).
- [slav13] A. Slav, C. Palade, I. Stavarache, V.S. Teodorescu, M.L. Ciurea, R. Müller, A. Dinescu, M.T. Sultan, A. Manolescu, J.T. Gudmundsson, and H.G. Svavarsson, *IEEE CAS 2017 Proceedings*, pp. 63–66 (2017).
- [ghit1] M. Katagiri, A. Birumachi, K. Sakasai, and K.Takahashi, *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **50**, 1043-1047 (2003).
- [ghit2] L. Verger, P. Ouvrier-Buffet, F. Mathy, G. Montemont, M. Picone, J. Rustique, and C. Riffard, *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **52**, 1733-1738 (2005).
- [ghit3] K. S. Shah, J. Glodo, M. Klugerman, W. M. Higgins, T. Gupta, and P. Wong, *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **51**, 2395-2399 (2004).
- [ghit4] E. Gyorgy, A. del Pino, C. Logofatu, C. Cazan, and A. Duta, *J. Am. Chem. Soc.* **97**, 2718-2724 (2014).
- [ghit5] S. M. O'Malley, J. Tomko, A. P. del Pino, C. Logofatu, and E. György, *J. Phys. Chem. C* **118**, 27911–27919 (2014).
- [banc1] X. Zhang, H. C. Zhang, W. X. Tang, J. G. Liu, Z. Fang, J. W. Wu, and T. J. Cui, *IEEE Ant. Wirel. Propag. Lett.*, DOI 10.1109/LAWP.2017.2768551 (2017).
- [nede1] I. M. Reaney and D. Iddles, *J. Am. Ceram. Soc.* **89**, 2063-2072 (2006).
- [nede2] M. T. Sebastian, R. Ubbi and H. Jantunen, *Int. Mater. Rev.* **60**, 392-412 (2015).
- [lori1] C. D. Feng, Y. Shimizu, M. Egashira, *J. Electrochem. Soc.* **141**, 220-225 (1994).
- [lori2] K. Fukui, M. Nakane, *Sens. Actuat. B – Chem.* **25**, 486-490 (1995).
- [lori3] N. Barsan, A. Tomescu, *Sens. Actuat. B – Chem.* **26**, 45-48 (1995).
- [lori4] M. Popescu, F. Sava, A. Lőrinczi, G. Socol, I.N. Mihăilescu, A. Tomescu, and C. Simion, *J. Non-Cryst. Solids* **353** 1865–1869 (2007).
- [lori5] M. Popescu, F. Sava, A. Lőrinczi, A. Tomescu, C. Simion, G. Socol, I.N. Mihailescu, S. Miclos, and D. Savastru, *Brevet OSIM acordat*, RO 123461- B1 / 29. 06. 2012.
- [lori6] S. Marian, K. Potje-Kamloth, D. Tsylyanu, H.-D. Liess, *Thin Solid Films* **359**, 108-112 (2000).
- [lori7] D. Tsiuleanu, S. Marian, K. Potje-Kamloth, an H.-D. Liess, *Patent No. DE 100 19010 A1*, 25. 10. 2001, Germany.
- [lori8] David B. Mitzi, *US Patent No. 6875661*, Issued on 4/05/2005.
- [lori9] H.-F. Liu, Q.-X. He, C.-T. Zheng, Y.-D. Wang, *Optoelectr. Lett.* **13**, 100-103 (2017).
- [lori10] H. Y. Ma, S. L. Qin, L. Y. Wang, G. Wang, X. H. Zhao, E. J. Ding, *Sens. Actuat. B – Chem.* **244**, 17-23 (2017).
- [sima1] M. Trojanovicz, *Trends Anal. Chem.* **25**, 480-489 (2006).
- [sima2] T. Ueda, M. M. H. Bhuiyan, H. Norimatsu, S. Katsuki, T. Ikegami, F. Mitsugi, *Physica E* **40**, 2272-2277 (2008).
- [sima3] P. F. Qi, O. Vermesh, M. Grecu, A. Javey, Q. Wang, H. J. Dai, S. Peng, and K. J. Cho, *Nano Letters* **3**, 347-351 (2003).
- [sima4] O. Kuzmych, B. L. Allen and A. Star, *Nanotechnology* **18**, 375502(1-7) (2007).
- [sima5] A. D'Amico, C. Di Natale, R. Paolesse, A. Macagnano, and A. Mantini, *Sens. Actuat. B – Chem.* **65**, 209-215 (2000).
- [sima6] A. Star, J. C.P. Gabriel, K. Bradley, and G. Gruner, *Nano Lett.* **3**, 459-463 (2003).
- [sima7] A. Star, T.-R. Han, V. Joshi, D. Steuerman, and J. R. Stetter, *Electroanalysis* **16**, 108-112 (2004).
- [sima8] A. Star, T.-R. Han, V. Joshi, J. C.P. Gabriel and G. Gruner, *Nanoelectronic Carbon Dioxide Sensors*, *Adv. Mater.* **16**, 2049-2052 (2004).
- [sima9] A. Star, E. Tu, J. Niemann, J. C.P. Gabriel, C. S. Joiner, and C. Valcke, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **103**, 921-926 (2006).

- [sima10] D. S. Hecht, R. J.A. Ramirez, M. Briman, E. Artukovic, K. S. Chichak, J. F. Stoddart and G. Gruner, *Nano Lett.* **6**, 2031-2036 (2006).
- [merc1] R. Vaßen, M. O. Jarligo, T. Steinke, D. E. Mack, and D. Stöver, *Surf. Coatings Technol.* **205**, 938-942 (2010).
- [merc2] J. Chevalier, L. Gremillard, A. V. Virkar, and D. R. Clarke, *J. Am. Ceram. Soc.* **92**, 1901-1920 (2009).
- [merc3] Y. Uzunonut, S. Uzgur, S. F. Diltemiz, and M. C. Kushan, *Adv. Mater. Res.* **214**, 349-353 (2011).
- [merc4] A. Sommers, Q. Wang, X. Han, C. T'Joel, Y. Park, and A. Jacobi, *Appl. Thermal. Eng.* **30**, 1277-1291 (2010).
- [merc5] T. Nakamura, T. Oka, K. Imanara, K. Shinohara, and M. Ishizaki, *IHI Eng. Rev.* **47**, 1 (2014).
- [merc6] B. S. Senturk, H. F. Garces, A. L. Ortiz, G. Dwivedi, S. Sampath, N. P. Padture, *J. Therm. Spray Technol.* **23**, 708-715 (2014).
- [merc7] B. T. Richards and H. N.G. Wadley, *J. Eur. Ceram. Soc.* **34**, 3069-3083 (2014).
- [pala1] G.E. Moore, *Electronics* **38**, 33-35 (1965).
- [pala2] Y.-H. Wu, L.-L. Chen, J.-R. Wu, M.-L. Wu, C.-C. Lin, and C.-H. Chang, *IEEE Electron Device Lett.* **31**, 1008-1010 (2010).
- [pala3] N. Miyata, *Materials* **5**, 512-527 (2012).
- [pala4] T.-C. Chang, F.-Y. Jian, S.-C. Chen, and Y.-T. Tsai, *Mater. Today* **14**, 608-615 (2011).
- [pala5] K. Ray, S. Maikap, W. Banerjee, and S. Das, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **46**, 153001 (1-31) (2013).
- [pala6] S. Adachi in *Optical Constants of Crystalline and Amorphous Semiconductors*, Springer, Boston, pp. 94-112 (1999).
- [pala7] Y.-H. Lin, C.-C. Chien, C.-T. Lin, C.-T. Lin, C.-Y. Chang, and T. F. Lei, *IEEE Electron Device Lett.* **26**, 154-156 (2005).
- [pala8] M. Carrada, B. S. Sahu, C. Bonafos, F. Gloux, J. Groenen, D. Muller, and A. Slaoui, *Thin Solid Films* **543**, 94-99 (2013).
- [pala9] V. Saikiran, N. Manikantababu, N. S. Rao, S. V. S. Rao, A. P. Pathak, *Adv. Mater. Lett.* **7**, 957-963 (2016).
- [pala10] D. Wilk, R. M. Wallace, and J. M. Anthony, *J. Appl. Phys.* **87**, 484(1-10) (2000).
- [pala11] A. Slav, C. Palade, A. M. Lepadatu, M. L. Ciurea, V. S. Teodorescu, S. Lazanu, A.V. Maraloiu, C. Logofatu, M. Braic, and A. Kiss, *Scripta Materialia* **113**, 135-138 (2016).
- [pala12] D. Vasilache, A. Cismaru, M. Dragoman, I. Stavarache, C. Palade, A. M. Lepadatu and M. L. Ciurea, *Phys. Stat. Solidi A* **213**, 255-259 (2016).
- [pala13] A.M. Lepadatu, C. Palade, A. Slav, A. V. Maraloiu, S. Lazanu, T. Stoica, C. Logofatu, V. S. Teodorescu and M. L. Ciurea, *Nanotechnology* **28**, 175707(1-8) (2017).
- [pala14] C. Palade, A. M. Lepadatu, A. Slav, S. Lazanu, V. S. Teodorescu, T. Stoica, and M. L. Ciurea, *Appl. Surf. Sci.* **428**, 698-702 (2018).
- [boni1] A. G. Boni, I. Pintilie, L. Pintilie, D. Preziosi, H. Deniz, and M. Alexe, *J. Appl. Phys.* **113**, 224103(1-10) (2013).
- [boni2] C. Chirila, A. G. Boni, I. Pasuk, R. Negrea, L. Trupina, G. Le Rhun, S. Yin, B. Vilquin, I. Pintilie, and L. Pintilie, *J. Mater. Sci.* **50**, 3883-3894 (2015).
- [boni3] L. M. Hrib, A. G. Boni, C. Chirila, I. Pasuk, I. Pintilie, and L. Pintilie, *J. Appl. Phys.* **113**, 214108(1-10) (2013).
- [boni4] I. Pintilie, C.M. Teodorescu, C. Ghica, C. Chirila, A.G. Boni, L. Hrib, I. Pasuk, R. Negrea, N.G. Apostol, and L. Pintilie, *ACS Appl. Mater. Interf.* **6**, 2929-2939 (2014).
- [boni5] L. Pintilie, C. Ghica, C.M. Teodorescu, I. Pintilie, C. Chirila, I. Pasuk, L. Trupina, L. Hrib, A.G. Boni, N.G. Apostol, L.E. Abramiuc, R. Negrea, M. Stefan, and D. Ghica, *Sci. Rep.* **5**, 14974(1-14) (2015).
- [boni6] L. M. Trinca, A. C. Galca, A. G. Boni, M. Botea, and L. Pintilie, *Appl. Surf. Sci.* **427**, 29-37 (2018).
- [boni7] G. E. Stan, M. Botea, G. A. Boni, I. Pintilie, and L. Pintilie, *Appl. Surf. Sci.* **353**, 1195-1202, (2015).
- [boni8] M. Botea, A. Iuga and L. Pintilie, *Appl. Phys. Lett.* **103**, 232902(1-4) (2013).
- [boni9] A. G. Boni, C. Chirila, I. Pasuk, R. Negrea, I. Pintilie, and L. Pintilie, *Phys. Rev. Appl.* **8**, 034035(1-11) (2017).

- [boni10] J. S. Speck and W. Pompe, J. Appl. Phys. **76**, 466–476, (1994).
- [boni11] M. T. Kesim, J. Zhang, S. P. Alpay, and L. W. Martin, Appl. Phys. Lett. **105**, 052901(1-4) (2014).
- [boni12] K. J. Choi, M. Biegalski, Y. L. Li, A. Sharan, J. Schubert, R. Uecker, P. Reiche, Y. B. Chen, X. Q. Pan, V. Gopalan, L. Q. Chen, D. G. Schlom, and C. B. Eom, Science **306**, 1005-1009 (2004).
- [boni13] E. Bousquet, M. Dawber, N. Stucki, C. Lichtensteiger, P. Hermet, S. Gariglio, J.-M. Triscone, and P. Ghosez, Nature **452**, 732–736 (2008).
- [boni14] D. Lee, B. C. Jeon, A. Yoon, Y. J. Shin, M. H. Lee, T. K. Song, S. D. Bu, M. Y. Kim, J.-S. Chung, J.-G. Yoon, and T. W. Noh, Adv. Mater. **26**, 5005–5011 (2014).
- [boni15] P. Zubko, G. Catalan and A. K. Tagantsev, Annu. Rev. Mater. Res. **43**, 387–421 (2013).
- [boni16] G. Catalan, B. Noheda, J. McAneney, L. J. Sinnamon, and J. M. Gregg, Phys. Rev. B **72**, 020102(R)(1-4) (2005).
- [boni17] P. Zubko, G. Catalan, A. Buckley, P. R. L. Welche, and J. F. Scott, Phys. Rev. Lett. **99**, 167601(1-4) (2007).
- [hrib1] G. A. Smolenski and I. E. Chupis, Sov. Phys. Usp. **25**, 475 (1982).
- [hrib2] W. Eerenstein, N. D. Mathur and J. F. Scott, Nature **442**, 759–765 (2006).
- [hrib3] M.M. Kumar, V.R. Palkar, K. Srinivas, and S.V. Suryanarayana, Appl. Phys. Lett. **76**, 2764(1-3) (2000).
- [hrib4] H. Uchida, R. Ueno, H. Funakubo, and S. Koda, J. Appl. Phys. **100**, 014106(1-10) (2006).
- [hrib5] S. K. Singha and H. Ishiwara, Appl. Phys. Lett. **88**, 262908(1-3) (2006).
- [hrib6] X. D. Qi, J. H. Dho, R. Tomov, M. G. Blamire, J. L. MacManus-Driscoll, Appl. Phys. Lett. **86**, 062903(1-3) (2005).
- [lung1] H. Ohno, H. Munekata, T. Penney, S. von Molnár, and L. L. Chang, Phys. Rev. Lett. **68**, 2664-2667 (1992).
- [lung2] H. Ohno, Science **281**, 951-956 (1998).
- [lung3] T. Dietl, Nat. Mater. **9**, 965-974 (2010).
- [lung4] S. G. Cho, S. Choi, S. C. Hong, Y. Kim, J. B. Ketterson, B. J. Kim, Y. C. Kim, and J. H. Jung, Phys. Rev. B **66**, 033303(1-3) (2002).
- [lung5] Y. D. Park, A. T. Hanbicki, S. C. Erwin, C. S. Hellberg, J. M. Sullivan, J. E. Mattson, T. F. Ambrose, A. Wilson, G. Spanos, and B. T. Jonke, Science **295**, 651-654 (2002).
- [lung6] T. Dietl and H. Ohno, Rev. Mod. Phys. **86**, 187-251 (2014).
- [lung7] T. Dietl, K. Sato, T. Fukushima, A. Bonanni, M. Jamet, A. Barski, S. Kuroda, M. Tanaka, P. N. Hai, and H. Katayama-Yoshida, Rev. Mod. Phys. **87**, 1311-1377 (2015).
- [lung8] M. Gajdzik, C. Sürgers, M. Kelemen, B. Hillebrands, and H. v. Löhneysen, Appl. Phys. Lett. **68**, 3189-3190 (1996).
- [lung9] M. Gajdzik, C. Sürgers, M. Kelemen, and H. v. Löhneysen, J. Magn. Magn. Mater. **221**, 248-254 (2000).
- [lung10] E. Magnano F. Bondino, C. Cepek, L. Sangaletti, M. C. Mozzati, and F. Parmigiani, J. Appl. Phys. **111**, 013917(1-5) (2012).
- [lung11] G. A. Lungu, L. E. Stoflea, L. C. Tănase, I. C. Bucur, N. Radutoiu, F. Vasiliu, I. Mercioniu, V. Kuncser, and C. M. Teodorescu, Materials **7**, 106-129 (2014).
- [lung12] G. A. Lungu, N. G. Apostol and C. M. Teodorescu, in Nanomagnetism, J.M.G. Estevez (ed.), One Central Press, Manchester (UK), 2014, pp. 74-110.
- [lung13] L.C. Tanase, G.A. Lungu, L. E. Stoflea, I. C. Bucur, N. G. Apostol, R. M. Costescu, C. A. Tache, D. Macovei, A. Barinov, and C. M. Teodorescu, J. Mater. Sci. **52**, 3309-3320 (2017).
- [logo1] E. J. Houser, D. B. Chrisey, M. Bercu, N. D. Scarisoreanu, A. Purice, D. Colceag, C. Constantinescu, A. Moldovan, and M. Dinescu, Appl. Surf. Sci. **252**, 4871–4876 (2006).
- [logo2] R. Cristescu, D. Mihaiescu, G. Socol, I. Stamatina, I. N. Mihailescu, and D. B. Chrisey, Appl. Phys. A-Mater. **79**, 1023-1026 (2004).
- [logo3] C. Popescu, J. Roqueta, A. P. del Pino, M. Moussaoui, M. V. Nogués, and E. Gyorgy, J. Mater. Res. **26**, 815-821 (2011).
- [logo4] F. Sima, E. C. Mutlu, M. S. Eroglu, L. E. Sima, N. Serban, C. Ristoscu, S. M. Petrescu, E. T. Oner, and I. N. Mihailescu, Biomacromolecules **12**, 2251-2256 (2011).

- [logo5] F. M. Miroiu, G. Socol, A. Visan, N. Stefan, D. Craciun, V. Craciun, G. Dorcioman, I. N. Mihailescu, L. E. Sima, S. M. Petrescu, A. Andronie, I. Stamatina, S. Moga, and C. Ducu, *Mater. Sci. Eng. B-Adv.* **169**, 151-158 (2010).
- [logo6] L. Floroian, M. Florescu, F. Sima, G. Popescu-Pelin, C. Ristoscu, and I. N. Mihailescu, *Mater. Sci. Eng. C-Mater.* **32**, 1152-1157 (2012).
- [logo7] I. A. Paun, V. Ion, C. R. Luculescu, M. Dinescu, S. Canulescu, and J. Schou, *Appl. Phys. A-Mater.* **109**, 223-232 (2012).
- [logo8] E. Gyorgy, A. del Pino, C. Logofatu, C. Cazan, and A. Duta, *J. Am. Ceram. Soc.* **97**, 2718-2724, (2014).
- [logo9] S. M. O'Malley, J. Tomko, A. P. del Pino, C. Logofatu, and E. György, *J. Phys. Chem. C* **118**, 27911–27919 (2014).
- [logo10] A. P. del Pino, E. Gyorgy, C. Logofatu, J. Puigmarti-Luis and W. Gao, *Carbon* **93**, 373-383 (2015).
- [logo11] A. Datcu, L. Duta, A. P. del Pino, C. Logofatu, C. Luculescu, A. Duta, D. Perniud, and E. Gyorgy, *RSC Adv.* **5**, 49771-49779 (2015).
- [logo12] E. György, A. P. del Pino, A. Datcu, L. Duta, C. Logofatu, I. Iordache, and A. Duta, *Ceram. Int.* **42**, 16191–16197 (2016).
- [logo13] I. Camps, M. Borlaf, M. T. Colomer, R. Moreno, L. Dutac, C. Nita, A. P. del Pino, C. Logofatu, R. Serna, and E. Gyorgy, *RSC Adv.* **7**, 37643-37653 (2017).
- [logo14] A. Queralto, Á. P. del Pino, C. Logofatu, A. Datcu, R. Amade, I. Alshaikh, E. Bertran, I. Urzica, and E. György, *J. Alloys Compds.* **726**, 1003-1013 (2017).
- [logo15] E. György, C. Logofatu, Á. P. del Pino, A. Datcu, O. Pascu, and R. Ivan, *Ceram. Int.* **44**, 1826–1835 (2018).
- [tach1] J. H. Park, W. C. Mitchel, L. Grazulis, H. E. Smith, K. Eyink, J. J. Boeckl, D. Tomich, S. D. Pacley and J. E. Hoelscher, *Adv. Mater.* **22**, 4140–4145 (2010).
- [tach2] M. Batzill, *Surf. Sci. Rep.* **67**, 83–115 (2012).
- [tach3] N. G. Apostol, G. A. Lungu, I. C. Bucur, C. A. Tache, L. Hrib, L. Pintilie, D. Macovei, and C. M. Teodorescu, *RSC Adv.* **6**, 67883–67887 (2016).
- [tach4] F. Presel, C. A. Tache, H. Tetlow, D. Curcio, P. Lacovig, L. Kantorovich, S. Lizzit, and A. Baraldi, *J. Phys. Chem. C* **121**, 11335–11345 (2017).
- [icio1] F. Dinelli, R. Capelli, M. A. Loi, M. Murgia, M. Muccini, A. Facchetti, T. J. Marks, *Adv. Mater.*, **18** (11), 1416, 2006.
- [icio2] R. Capelli, S. Toffanin, G. Generali, H. Usta, A. Facchetti, M. Muccini, *Nat. Mater.*, **9**(6), 496, 2010.
- [icio3] G. Horowitz, *Adv. Mater.* **10**, 365-377 (1998).
- [icio4] J. Swensen, C. Soci and A. J. Heeger, *Appl. Phys. Lett.* **87**, 3511(1-3) (2005).
- [icio5] J. Zaumseil, C.R. McNeill, M. Bird, D. L. Smith, P. P. Ruden, M. Roberts, M. J. McKiernan, R. H. Friend, and H. Sirringhaus, *J. Appl. Phys.* **103**, 064517(1-11) (2008).
- [secu1] B. Constantinescu, P. T. Frangopol, *Revista de Politica Științei și Scientometrie* **1**, 333-337 (2012).
- [secu2] M.J. Aitken, *Thermoluminescence Dating*, Academic Press, New York, 1985.
- [secu3] C. E. Secu, M. Cherestes, M. Secu, C. Cherestes, V. Paraschiva, and C. Barca, *Radiat. Meas.* **46** 1109-1112 (2011).
- [secu4] M. Secu, C. E. Secu, S. Jipa, T. Zaharescu, and M. Cutrubinis, *Rad. Meas.* **43**, 383-386 (2008).
- [secu5] M. Cutrubinis, D. Chirita, D. Savu, C. E. Secu, R. Mihai, M. Secu, and C. Ponta, *Radiat. Phys. Chem.* **76**, 1450-1454 (2007).
- [secu6] Raport de cercetare al proiectului aplicativ cu firma ALFA CENTAUR SRL „Efectuarea de măsuratori de termoluminescență și datare arheologică” (2016).
- [secu7] A. Emandi, M. Secu and M. Marinescu, *Dating protocol of the neo-Byzantine Icon from Romanian Orthodox Church St. Archangels Voluntari*, Cons. Rest. Patr. Cult., vol XII, p. 280 (2013).
- [secu8] Raport proiectul CERIC nr. 20152075: “Studiu multianalitic al pigmentilor lac-roșu istorici pentru intelegerea complexului ion metalic – antrachinona” in colaborare cu Politehnica din Milano, Italia.
- [secu9] M. Baibarac, I. Baltog and S. Lefrant, *J. Appl. Phys.* **110**, 053106(1-7) (2011).
- [secu10] C. Bartha, C. E. Secu, E. Matei, and M. Secu, *CrystEngComm* **19**, 4992-5000 (2017).

2.4. Dotări pentru desfășurarea lucrării:

2.4.1. Dotări existente:

INCDFM posed o infrastructura de inalt nivel, care acopera toate necesitatile de la preparare de material pana la dezvoltarea de aplicatii la nivel de demonstrator functional in laborator.

Echipamentele puse la dispozitia proiectelor componente sunt listate in tabelul de mai jos (valori mai mari de **15.000 euro**)

Valoarea achiziției (euro)	Numele infrastructurii	Data achiziției (ll-aa)
22411	Sistem criostatic cu compresor	Jul-05
16198	Analizor de rețele vectorial VNA Master cu banda 2MHz-6MHz	Oct-06
203655	Analizor vectorial de rețele	Aug-08
24200	Spectrometru luminiscenta	Feb-06
41431	Potentiostat/Galvanostat	Sep-07
33422	Analizor de impedanta 4294A	Jul-06
37462	Microscop de fluorescenta Mot.	Sep-06
287111	Microscop electronic de baleiaj + acces.	May-08
80015	Extensie analizor vectorial + acces.	Mar-08
75488	Spectrofotometru UV-VIS Varian	Mar-08
59738	Instalatie pulverizare pt. filme subtiri	May-08
22585	Instalatie corodare in plasma picosecunda	May-08
361972	Echipament PLD Workstation	Jun-08
169948	Microscop de forta atomica	Jun-08
19281	Analizor de spectru-MS 2724B	Aug-08
34878	Instalatie depunere straturi subtiri	Sep-08
22306	Cuptor tratamente termice LHT08118	Oct-08
82073	Spectropolarimetru J815	Oct-08
49604	Strung paralel comanda numerica	Nov-08
73273	Stand de masura cu microsonde	Dec-08
63494	Sistem depunere straturi subtiri	Feb-09
208776	Sistem depunere prin pulverizare Gama	Feb-09
71091	Spectrometru de fluorescenta	May-09
66507	Sistem masura si analiza Hera-DLTS	Dec-09
19116	Criostat cu circulatie de azot	Dec-09
106318	Physisorption ASAP 2020	Aug-10
18364	Echipament de sudura cu ultrasunete	Sep-10
47143	Sistem de calcul numeric	Aug-11
246418	Difractometru raze X D8Advance	Dec-06
43024	Analizor vectorial de rețele cu accesorii	Dec-06
25637	Sistem caracterizare materiale Premier II	May-08
30728	Calorimetru diferential Inv.+Dot	Dec-04
370932	Criostat cu magnet supraconductor	Oct-07
24534	Mini Moke AMACC	May-06
30323	Generator HIT6 Trat. Term+acces	Mar-06
44869	Calorimetru Netzsch baleiaj	Apr-06
23733	Cuptor orizontal pt. temperaturi inalte	Mar-08
53078	Aparatura Melt Spinner SC BULHER	Oct-07

225637	Criomagnet fara agent racire	Dec-06
40459	Sistem Masura Rezistivitatii si Efect Hall	Mar-08
20909	Sistem Vidare 2 trepte cu accesorii	Mar-08
76031	Instalatie de masura a proprietatilor termice	Mar-08
65023	Sistem Automatizat masuratori ciclice	Dec-07
158722	Instalatie de Sinterizare Spark Plasma	May-08
41684	Microscop optic pt. polarizare	May-08
25698	Cluster 8 Noduri + Retea calculatoare PC	Jun-08
69681	Spectrometru de masa	Sep-08
81847	Criostat Mossbauer circuit inchis	Feb-09
34153	Statie de lucru in atmosfera inerta	Sep-08
17695	Cuptor tratamente termice	Oct-08
76200	Cuptor microunde pentru sintetizare	Feb-09
185089	Instalatie de sinteza a probelor	Aug-09
94491	Aparatura de tip Laser Flash	Sep-09
19777	Sistem refrigerat circuit Inchis	Sep-04
29089	Sursa Raze X tip XR-50 + accesorii	Dec-06
20000	Criostat optic pt. masuratori electrice	Dec-07
18267	Generator RF + Sistem Racire	Dec-07
103163	Analizor semisferic de electroni (XPS)	Dec-07
24121	Tun de electroni pt. difractie de electroni rapizi	Mar-08
36115	Dispozitiv difractie electroni lenti	Mar-08
106384	Difractometru de raze X	Mar-08
38854	Monitor multigaz tip 1314-5	May-08
26359	Profilometru Ambios XP-100	Oct-08
28422	Sursa raze X XR-50	Nov-08
93529	Laser continuu	Nov-08
56088	Sistem de masuratori electrice in camp magnetic	Dec-08
24656	Sistem pt. masuratori galvanomagnetice	Dec-08
53963	Detector Raze X cu accesorii	Dec-08
153560	Incinta epitaxie in flux molecular	Dec-08
47128	Evaporator cu fascicul electronic	Dec-08
30853	Incinta masuratori si analize	Dec-08
129407	Microscop cu efect tunel + accesorii	May-09
474281	Instalatie complexa pt. XPS, AES, STM	Jul-09
18485	Evaporator tip celula Knudsen	Sep-09
522940	Echipament de pulverizare cu magnetron	Sep-09
46675	Sistem de pompaj Varian + Pfeiffer	Sep-10
105360	Elipsometru Woolham M2000	Nov-10
17708	Instalatie Spectroscopie fotoelectroni XPS	Jan-01
24650	Laser ND:YAG	Jan-02
22642	Sonda Kelvin digitala + accesorii	Jan-02
42716	Spectrofotometru FTIR + accesorii	Dec-06
39492	Spectrofotometru UV/VIS/NIR	Dec-06
115711	Spectrofluorimetru Fluorolog	Dec-06
118042	Spectrometru Raman RFS-100	Nov-05
18827	Electrometru 6517A cu accesorii	Mar-06
14900	Pompa vid cu accesorii Alcatel	Mar-06

26875	Sfera + sistem Reflexie difuza	Jun-07
20522	Sistem Laser cu corp solid YAC	Jun-07
46476	Microscop FT + Soft pt. RFS + obiectiv	Mar-06
28231	Modul depunere straturi alternate	Mar-06
60752	Tensiometru Kruss DSA 100	Sep-07
33764	Laser cu Kripton RK Tech	Aug-07
29071	Laser cu Argon RK Tech	Aug-07
24397	Potentiostat Voltalab 80	May-06
14982	Spectrofotometru optic M. Solar	Dec-07
160209	Sistem Masuratori Parametri Dielectrice	Mar-08
51593	Sistem Criostatic + incalzire si vidare	Mar-08
141200	Spectroelipsometru	Mar-08
14953	Aparat Polizat Substraturi si Aliniere	May-08
25969	Up-Grade Aparat de depunere straturi subtiri	Sep-08
116170	Sistem microscopie FTIR	Oct-08
23781	Glove Box	Nov-08
52075	Glove Box	Nov-08
264636	Sistem Depunere prin evaporare	Dec-08
34672	Sistem Integrat Langmuir-Blodgett	Dec-08
171354	Microscop optic cu scanare	Feb-09
31453	Microscop optic cu polarizare	Feb-09
24259	Echipament Dozimetric tip cititor	Sep-09
80059	Sursa alimentare Magnet Varian Res	Dec-06
22049	Microscop metalografic	Jun-07
28294	Consola digitala pentru sursa al.res ???	Sep-07
15276	Magnetometru RMN Teslameter	Sep-07
38380	Camera Digitala Olympus + Soft ITEM	May-06
21291	Cavitate de rezonanta pt. RES	Dec-07
29986	Criostat masuratori Spectroscopie	Mar-08
14464	Vas de presiune teflonat	May-08
26453	Autoclava de laborator de presiune mare	Aug-08
17974	Accesorii de temperatura variabila (Platforma Digitala)	Aug-08
113604	Instalatie de subtiere ionica	Sep-08
107303	Instalatie automata de Lichefiere Helium	Dec-08
26926	Sistem temperatura variabila cu Helium	Feb-09
311133	Platforma digitala pt. tehnica RES	Feb-09
123402	Spectrometru Mossbauer + accesorii	Aug-09
17028	Amplificator de radiofrecventa	Aug-09
46096	Microscop electronic JEOL200CX + Detector EDS	Dec-06
35300	Spectrometru RES CMS 8400	Nov-08
20010	Analizor de spectru	Dec-06
36576	Monocromator Sist. Radiometric	Dec-06
73236	Sistem masurare a proprietatilor feroelectrice	Aug-09
238283	Microscop Raman	Sep-09
103977	Statie testare la temperaturi joase	Sep-09
497529	Spectrofotometru de fluorescenta	Sep-09
527782	Instalatie Spectroscopie de electroni cu rezolutie unghiulara si de spin	Sep-09

538036	Analizor vectorial + panouri absorbante	May-10
807767	Spectrometru RES in pulsuri	May-10
850274	Instalatie Microscopie LEEM	Oct-10
186635	Instalatie de nanolitografie SEM	Nov-10
226638	Sistem SPM - Microscop de forta	Nov-10
114020	Stand masura linii dimensionalitate redusa	Nov-10
569343	Spectrometru pt. domeniul THz	Nov-10
966763	Sistem complex de masuratori SQUID-PPMS	Nov-10
227407	Instalatie de fotolitografie	Nov-10
497192	Sistem dual SEM-FIB + accesorii	Dec-10
2255815	Microscop electronic JEM ARM + accesorii	Dec-10
404223	Spectrometru XAS de absorbtie a radiatiei X	Feb-11
141786	Suport pozitionare pt. instalatie SEM	Feb-11
115227	Statie pt. lichefiere Heliu	Feb-11
14629	Tun de electroni EQ 22	Feb-11
140273	Spectrometru Mossbauer	Feb-11
37574	Manipulator de probe pt. MBE	Feb-11
35069	Sursa cu descarcare in plasma RF	Feb-11
147218	Instalatie de metalizare (materiale necontaminante)	Mar-11
147218	Instalatie de metalizare (materiale contaminante)	Mar-11
581388	Echipament de litografie de electroni - Instalatie de rezolutie ridicata	Nov-15
999838	Microscop electronic prin transmisie pentru caracterizari microstructurale in contrast de difractie, tomografie cu fascicul de electroni si experimente in-situ in dom. de temperaturi -195÷+1000 °C	Nov-15
362064	Echipament CVD pentru depunerea de semiconductori de banda larga de tip III-V si II-VI, precum si de materiale dielectrice de tip oxid sau nitrura	Nov-15
140084	Echipament CVD pentru depuneri de materiale pe baza de carbon, cu precadere grafena si nanotuburi de carbon	Nov-15
666666	Unitate de spectroscopie de fotoelectroni XPS cu facilitati de tratament al probelor la presiune si temperatura ridicata	Nov-15
58889	Cromatograf de gaze cuplat cu spectrometru de masa GC-MS	Nov-15
140000	Echipament CVD pentru depuneri de materiale polimerice	Nov-15
442667	Sistem pentru depunere de straturi subtiri asistata de matrice folosind pulsuri laser (MAPLE)	Nov-15
93111	Sistem de masura a proprietatilor termoelectrice	Nov-15
93211	Statie de masura a proprietatilor electrice	Nov-15
2727030	CLADIREA RITECC-CENTRUL DE CERCETARE, INOVARE SI TEHNOLOGII	Ian-16
15231	STATIE GRAFICA IMAGO R4	Iun-16
15685	POMPA TURBO PM 133935-T HIPACE	Iun-16
25344	MODUL SFERA INTEGRATOARE CU ACCESORII	Iun-16
26152	COMSOL MULTIPHYSICS FNL LICENSE	Sept-16
39008	CRIOSTAT CU CIRCUIT INCHIS CS204 PB	Oct-2016
399376	ECHIPAMENT PT.FABRICAREA DE STRATURI SUBTIRI	Ian-2017
21555	ANALIZOR ELECTROCHIMIC CTR.27/01.09.16POC	Ian-2017
24687	POTENTIOSTAT CTR.27/01.09.16POC	Ian-2017

15206	SURSA TENSIUNE AK-60P-105-L(400V)	Apr-2017
26326723		

Valoarea totala a echipamentelor cu pret de achizitie mai mare de 15.000 euro depaseste 120.000.000 lei. Cu celelalte echipamente, avand valori mai mici de 15.000 euro, si cu toate licentele software achizitionate, plus contributia proprie la consorțiul ANELIS+ pentru acces la literatura stiintifica, INCDFM pune la dispozitia viitorului Program Nucleu o infrastructura de cercetare in valoare de circa 150.000.000 lei.

2.4.2. Dotări necesare:

Pentru partea de modelari teoretice se propune achizitionarea a doua sisteme de calcul DELL cu specificatiile minimale urmatoare:

Module	Description	Sku
Base	PowerEdge R730 for Intel v4 CPUs	[210-ACXU] [329-BCZK]
Chassis Configuration	Chassis with up to 8, 2.5" Hard Drives	[350-BBEN]
Processor	Intel Xeon E5-2698 v4 2.2GHz 50M Cache 9.60GT/s QPI Turbo HT 20C/40T (135W) Max Mem 2400MHz	[338-BJDX]
Additional Processor	Intel Xeon E5-2698 v4 2.2GHz 50M Cache 9.60GT/s QPI Turbo HT 20C/40T (135W) Max Mem 2400MHz	[338-BJED]
Processor Thermal Configuration	2 CPU Standard	[370-ABWE] [374-BBHM] [374-BBHM]
Memory Configuration Type	Performance Optimized	[370-AAIP]
Memory DIMM Type and Speed	2400MT/s RDIMMs	[370-ACPH]
Memory Capacity	(16) 16GB RDIMM, 2400MT/s, Dual Rank, x8 Data Width	[370-ACNX]
Operating System	No Operating System	[611-BBBF]
OS Media Kits	No Media Required	[605-BBFN]
RAID Configuration	C3 - RAID 1 for H330/H730/H730P (2 HDDs or SSDs)	[780-BBJU]
RAID Controller	PERC H730 RAID Controller, 1GB NV Cache	[405-AAEG]
Hard Drives	(2) 300GB 10K RPM SAS 12Gbps 512n 2.5in Hot-plug Hard Drive	[400-AJPK]
Power Management BIOS Settings	Performance BIOS Setting	[384-BBBL]
Power Supply	Dual, Hot-plug, Redundant Power Supply (1+1), 750W	[450-ADWS]

Power Cords	(2) Rack Power Cord 2M (C13/C14 10A)	[450-AADY]
PCIe Riser	Risers with up to 6, x8 PCIe Slots + 1, x16 PCIe Slots	[330-BBCO] [330-BBCQ] [330-BBCR]
Embedded Systems Management	iDrac8, Express	[385-BBHN]
Network Daughter Card	Broadcom 5720 QP 1Gb Network Daughter Card	[540-BBBW]
Bezel	Quick Sync Bezel	[350-BBEQ]
Rack Rails	ReadyRails™ Sliding Rails With Cable Management Arm	[770-BBBR]
Internal Optical Drive	Internal DVD+/-RW, SATA	[429-AAPS]
Additional Shipping Box Labels	Not required	[888-10066]
Order Information	PowerEdge Order - EDB	[800-11671]
Consolidation Fees (EM-EMEA Only)	Consolidation Fee	[991-10021]
TPM Module	PowerEdge Server FIPS TPM 2.0	[461-AADM]
Service	1Yr Parts Only Warranty (Emerging Only)	[709-12777] [709-12779]
Support Services	3Yr Basic Warranty - Next Business Day (Emerging Only)	[710-10842] [710-64372] [710-64375]

Pretul estimat pentru cele doua sisteme este de 25.000 euro fara TVA. Ele vor spori puterea de calcul din INCDFM, necesara pentru modelari teoretice DFT si similare.

Pentru partea experimentală sunt necesare următoarele achiziții:

Echipament	Justificare si Caracteristici (pe scurt)	Pret aproximativ
SEM-EDX	Pentru analize rapide ale materialelor si structurilor preparate Cu analize EDX si EBSD	300.000 euro fara TVA
Spectrometru RMN de rutina	Field Strength: 1.4T (~60MHz) Half height resolution $\leq 0.5\text{Hz}$ Baseline width (at 0.55%) $\leq 20\text{Hz}$	70.000 euro fara TVA
Glove Box cu atmosfera controlata	Standardul include support, antecamera, pompa de vid si controller Braun (features of this system include a stand, large main antechamber , a rotary vane vacuum pump and a PLC-M. Braun controller . The standard LABstar package comprises of a single column inert gas purification system that is fully automatic and regenerable. The glovebox maintains atmosphere levels of less than 1 ppm oxygen and moisture.)	~20.000 euro fara TVA

	http://www.mbraun.com/products/glovebox-workstations/labstar-glovebox#specifications	
Microscop optic Nikon Ci-L –pol si sistem de achizitie imagini foto/video M-shot	prevazut cu doua surse de iluminare , polarizare si camera de 6,3 Mpxl. https://m.nikoninstruments.com/en_EU/Products/Upright-Microscopes/Research/Eclipse-Ci-POL http://www.m-shot.com/index.php?a=show&m=Product&id=112	16.000 euro fara TVA
Nisa chimica fixa	2 bucati pentru lab 10	12.000 euro fara TVA
Cuptor cu plasma UV de presiune joasa, Diener -Pico	Dimensiuni aparat: W 550 mm, H 330 mm, D 500 mm Dimensiuni incinta: Ø 150 mm, L 320 mm Volum incinta: approx. 5 l Gaze: 2 canale (via needle valve) Generator: 40 kHz/200 W, continuous Vacuum pump: Leybold, type Trivac D 2.5B (2.5 m3/h) Control: semi-automat durata tratament cu timer https://www.plasma.com/en/produkte/rent-lease/pico/	~ 5.000 euro fara TVA (nu am oferta)
Nisa chimica mobila		2.000 euro fara TVA
Cuptor tubular	Ofera SEPADIN cuptor seria LTF12 cu contorler 3216P1	3.000 GBP fara TVA
Spin coater	Novocontrol http://www.novocontrol.de/brochures/SCC200.pdf	3000 euro fara TVA
Statie gaze tehnice	Necesara pentru buna functionare a instalatiilor de preparare, va contine gaze nobile, oxigen, aer comprimat, etc.	200.000 lei fara TVA
Sistem de presare cu accesorii	Necesar pentru pregatirea probelor ceramice care stau la baza prepararii tintelor pentru depuneri de straturi subtiri dar si pentru cresteri de cristale in cuptoare speciale	70.000 lei fara TVA
Sistem Raman pentru filme subtiri	Sistemele Raman existente nu pot caracteriza straturi subtiri sau heterostructuri cu grosimi de ordinul 100 nm. Cum in INCDFM se prepara in mod curent filme subtiri din diverse materiale se impune achizitia unui sistem Raman performant pentru filme subtiri.	220.000 fara TVA
Laborator testari biologice in vitro	Este necesar pentru teste privind biocompatibilitatea materialelor pentru implanturi, proteze, etc.	1.000.000 fara TVA
Strung cu comanda numerica	Necesar pentru dezvoltarea de modele de laborator, demonstratori dar si pentru producerea in-house de noi instalatii si echipamente	1.000.000 fara TVA
Ferritester	Necesar pentru caracterizare structuri feroice	60.000 euro fara TVA
SQUID	Necesar pentru masuratori magnetice de finete.	500.000 euro fara TVA
Echipamente de vid	Necesare pentru asigurarea unui vid cat mai bun in diferite instalatii de depunere sau de caracterizare	100.000 euro fara TVA
Echipamente electronice (Nanonics, Keithley, Agilent, Tektronix, etc.)	Este vorba de echipamente deicate pentru diferite tipuri de caracterizari, achizitie de semnal, surse de alimentare, etc.	250.000 euro fara TVA

La cele de mai sus se adauga diverse alte piese de schimb pentru echipamentele deja existente precum si materiale/consumabile/servicii.

3. SCHEMA DE REALIZARE

3.1. Faze de realizat pe toată durata cercetării:				
Nr. crt.	Luna începere/luna finalizare	Denumire faza	Valoare - lei -	Termen de predare¹
ANUL 2019				
TEMA 1				
1	Ianuarie/martie	Proprietatile optice ale fotorezistului SU8 si modelarea acestora in prezenta nanoparticulelor de carbon	1000000	10.03.2019
2	Ianuarie/aprilie	Studii spectrale si analiza fenomenelor de interferenta cuantica in sisteme bipartite.	900000	10.04.2019
3	Ianuarie/mai	Proprietatile luminescente si magnetice ale materialelor nanostructurate multifunctionale dopate cu pamanturi rare	1000000	10.05.2019
4	Ianuarie/iunie	Fenomenul de histerezis in celule solare cu perovskiti – studii experimentale si teoretice	1000000	10.06.2019
5	Ianuarie/iunie	Competitia dintre localizarea polaronica si conductivitate in oxizi de mangan	1000000	10.06.2019
6	Ianuarie/iulie	Termodinamica proceselor de comutare a polarizarii feroelectrice: aplicarea modelului Landau-Ginzburg- Devonshire pentru structuri multistrat cu aplicatii in memorii cu stari multiple	900000	10.07.2019
7	Ianuarie/august	Fenomene de capacitate negativa in structuri feroelectrice	1000000	10.08.2019
8	Ianuarie/septembrie	Rolul modurilor optice si vibrationale in functionarea unor sisteme hibride cu posibile aplicatii in nanofotonica si metrologie cuantica: abordare teoretica si computationala	900000	10.09.2019
9	Ianuarie/octombrie	Proprietatile spectro-electrochimice ale nanotuburilor de carbon cu un singur perete inalt separate in tuburi metalice si semiconductoare functionalizate prin electro-oxidarea trifenilaminei	1000000	10.10.2019

¹ Nu se prevăd termene de predare în ultimele 2 săptămâni din trimestru și nici mai târziu de 10 decembrie a.c. Data predării la autoritatea de stat pentru cercetare este ulterioară datei de finalizare a fazelor (**ex: dată de predare: 10 decembrie/ data finalizare activități și întocmire proces verbal de avizare internă: maxim 09 decembrie**).

3.1. Faze de realizat pe toată durata cercetării:				
Nr. crt.	Luna începere/luna finalizare	Denumire faza	Valoare - lei -	Termen de predare¹
10	Ianuarie/decembrie	Studiul distribuțiilor de sarcină și potențial, și al alinierii benzilor de energie în interfete $\text{BaSnO}_3\text{-MAPbI}_3$ prin metode <i>ab initio</i>	900000	10.12.2019
	TEMA 2			
1	Ianuarie/martie	Investigarea spectro-nanoscopică a suprafețelor feroelectrice	1000000	10.03.2019
2	Ianuarie/martie	Noi compusi Heusler. Studiul proprietăților magnetice și termoelectrice în raport cu structura electronică specifică.	1000000	10.03.2019
3	Ianuarie/aprilie	Controlul proprietăților magnetice și de structură locală ale unor nanoparticule de tip miez-înveliș cu miezul de fier sau oxid de fier prin tratamente termice în atmosferă de hidrogen	1000000	10.04.2019
4	Ianuarie/mai	Straturi subțiri de WO_3 : sinteză și proprietăți structurale, magnetice și fotocatalitice.	1000000	10.05.2019
5	Ianuarie/iunie	Morfologie controlată în materiale compozite și aliaje speciale.	1000000	10.06.2019
6	Ianuarie/iunie	Materiale feroelectrice fără plumb crescute epitaxial	1000000	10.06.2019
7	Ianuarie/iulie	Studii ale materialelor nanostructurate cu proprietăți magnetice dure, obținute în sisteme fără pamanturi rare	1000000	10.07.2019
8	Ianuarie/septembrie	Sinteză de nanoparticule încărcate pe suprafețe feroelectrice și studiul <i>in situ</i> al reactivității acestor suprafețe	1000000	10.09.2019
9	Ianuarie/octombrie	Nanostructuri hibride supraconductor-feromagnet	1000000	10.10.2019
10	Ianuarie/noiembrie	Nanofibre polimerice funcționalizate cu TiO_2 și ZnO pentru aplicații de fotocataliză	1000000	10.11.2019
11	Ianuarie/decembrie	Studiul proprietăților fotoelectrice ale filmelor nanocristaline pe baza de aliaje binare din sistemul SiGeSn	1000000	10.12.2019
	TEMA 3			
1	Ianuarie/mai	Studii coloidale ale hidroxiapatitei dopate cu argint și studii de citotoxicitate pe celule procariote.	1000000	10.05.2019
2	Ianuarie/iulie	Materiale nanocompozite pe bază de derivați de celuloză și particule de carbon pentru obținerea de platforme senzoriale 3D flexibile	1000000	10.07.2019
3	Ianuarie/august	Investigații privind efectul alotropilor carbonului asupra agregării proteinelor implicate în declanșarea bolii Alzheimer.	1000000	10.08.2019

3.1. Faze de realizat pe toată durata cercetării:				
Nr. crt.	Luna începere/luna finalizare	Denumire faza	Valoare - lei -	Termen de predare¹
4	Ianuarie/septembrie	Dezvoltarea de metasuprafețe și testarea acestora prin tehnici rezonante de analiză pentru aplicații în bioeconomie și sănătate.	900000	10.09.2019
5	Ianuarie/decembrie	Materiale biocompatibile pentru cuantificarea concentrației de peroxid în mediu apos	1000000	10.12.2019
6	Ianuarie/decembrie	Studiul efectelor campurilor magnetice variabile și statice asupra reacțiilor fotocatalitice pe suprafața nanoparticulelor de TiO ₂	1000000	10.12.2019
	TEMA 4			
1	Ianuarie/martie	Materiale termoelectrice nanocompozite pe baza de skutteruditi	900000	10.03.2019
2	Ianuarie/iunie	Dezvoltarea modelului teoretic de conducție pentru filme compacte de oxizi metalici semiconductori cu aplicații în detectia de gaze.	900000	10.06.2019
3	Ianuarie/iunie	Evaporator cu bombardament electronic pentru depunere de straturi grafenice.	900000	10.06.2019
4	Ianuarie/iulie	Filme subțiri pe baza de oxid de hafniu dopat sau nedopat pentru aplicații electronice	900000	10.07.2019
5	Ianuarie/octombrie	Influența compoziției filmelor de NC de Ge imersate în matrici dielectrice asupra proprietăților optice	1000000	10.10.2019
6	Ianuarie/noiembrie	Creștere cristal de tip perovskit hibrid pentru aplicații fotovoltaice	1000000	10.11.2019
SUBTOTAL anul 2019			32.100.000	
ANUL 2020				
	TEMA 1			
1	Ianuarie/februarie	Investigarea impactului dopării asupra masei efective în heterostructuri multiferoice folosind spectroscopia de fotoelectroni cu rezoluție unghiulară (ARPES).	1000000	10.02.2020
2	Ianuarie/martie	Modelarea computațională a heterostructurilor MAPbI ₃ -BaTiO ₃ prin introducerea unor straturi ultrasubțiri intermediare (interlayers)	1000000	10.03.2020
3	Ianuarie/martie	Modelări teoretice ale efectelor magneto-mecanice în nanomagnetii moleculari sau artificiali	1000000	10.03.2020
4	Ianuarie/aprilie	Creșterea și caracterizarea izolatorului topologic YBiO ₃	1000000	10.04.2020
5	Ianuarie/mai	Originea și proprietățile starilor de margine chirale și nechirale în sisteme bidimensionale complexe	1000000	10.05.2020

3.1. Faze de realizat pe toată durata cercetării:				
Nr. crt.	Luna începere/luna finalizare	Denumire faza	Valoare - lei -	Termen de predare¹
6	Ianuarie/iulie	Modelarea proprietatilor structurale ale compusilor organometalici. Confirmari experimentale prin Rezonanta Nucleara Magnetica (RMN), absorbtie de raze X (EXAFS) si difractie de raze X (XRD).	1000000	10.07.2020
7	Ianuarie/septembrie	Studiul defectelor extinse si a interfetelor in heterostructuri feroelectrice epitaxiale fara plumb	1000000	10.09.2020
8	Ianuarie/octombrie	Influenta campurilor de depolarizare asupra proprietatilor electrice in heterostructuri multistrat feroelectrice	1000000	10.10.2020
9	Ianuarie/decembrie	Studiul proceselor de polarizare electrică în sisteme organice	1000000	10.12.2020
	TEMA 2			
1	Ianuarie/aprilie	Studii experimentale privind relaxarea structurala a filmelor epitaxiale feroelectrice	1000000	10.04.2020
2	Ianuarie/mai	Studiul efectelor hard/soft ale unor co-dopanti in piezoceramicile de tip PZT	1000000	10.05.2020
3	Ianuarie/mai	Efecte asupra structurii cristaline locale si proprietatilor electronice determinate de substitutia Pb prin Pt in sistemul $Li_2(Pd_{1-x}Pt_x)_3B$, investigate prin calcule 'first principles' si experiment.	1000000	10.05.2020
4	Ianuarie/iunie	Magneți durificați prin cuplaj de schimb bazați pe oxizi de fier	1000000	10.06.2020
5	Ianuarie/iunie	Investigarea relației microstructură-proprietăți in materialele feroelectrice Responsabil Dr. L. Trupina	1000000	10.06.2020
6	Ianuarie/iulie	Compozite metalo ceramice stabile termochimic pentru aplicatii la temperaturi inalte	1000000	10.07.2020
7	Ianuarie/august	Cercetari experimentale privind prepararea si caracterizarea unor nanostructuri compozite multifunctionale-piezoelectrice/feroelectrice cu arhitectura de tip core-shell	1000000	10.08.2020
8	Ianuarie/septembrie	Sinteza si caracterizarea hidroxiclururii de zinc, o alternativa interesanta pentru obtinerea nano si micro particulelor de oxid de zinc	1050000	10.09.2020
9	Ianuarie/septembrie	Straturi subtiri nanostructurate din supraconductori cu temperatura critica ridicata.	1100000	10.09.2020

3.1. Faze de realizat pe toată durata cercetării:				
Nr. crt.	Luna începere/luna finalizare	Denumire faza	Valoare - lei -	Termen de predare¹
10	Ianuarie/noiembrie	Studiul structurii unor compusi intermetalici de tip Ni-Ge sau Ni-Si formati prin reactie in stare solida pe suprafata monocristalelor de Ge, respectiv Si	1100000	10.11.2020
11	Ianuarie/decembrie	Sisteme magnetice low-cost fara pamanturi rare, cu proprietati similare fazelor tetragonale L10.	1100000	10.12.2020
TEMA 3				
1	Ianuarie/februarie	Studii privind proprietatile straturilor subtiri din bazele acizilor nucleici ca biomateriale pentru aplicatii in electronica	1100000	10.02.2020
2	Ianuarie/martie	Modularea caracteristicilor (nano)-mecanice ale acoperirilor subțiri implantologice.	1100000	10.03.2020
3	Ianuarie/iunie	Sisteme nanodimensionale cu proprietati ajustabile utilizabile pentru hipertermia magnetica	1100000	10.06.2020
4	Ianuarie/august	Oxizi micști pe baza de Mn-Co: materiale pentru oxidarea glicerolului	1100000	10.08.2020
5	Ianuarie/octombrie	Studiul proprietăților duale, hipertermice și fotocatalitice, ale unor sisteme nanocompozite de tip metal-/oxid magnetic-TiO ₂ cu potențial aplicativ în terapii antitumorale combinate.	1100000	10.10.2020
6	Ianuarie/decembrie	Studiul unor noi materiale piezoceramice pentru aplicații in domeniul sănătății.	1100000	10.12.2020
TEMA 4				
1	Ianuarie/martie	Descompunerea fotoelectrocatalitică a apei cu ajutorul unor sisteme fotocatalitice tricomponente optimizate.	1100000	10.03.2020
2	Ianuarie/aprilie	Atenuatoare si defazoare cu materiale dielectrice pentru unde milimetrice si THz.	1000000	10.04.2020
3	Ianuarie/iulie	Realizarea de celule fotoelectrochimice pentru descompunerea apei.	1000000	10.07.2020
4	Ianuarie/septembrie	Multistraturi Langmuir-Blodgett pe bază de acizi grași si nanotuburi de carbon, dopate cu metaloporfirine. Sinteza, caracterizare si aplicatii in senzoriala.	1100000	10.09.2020
5	Ianuarie/octombrie	Straturi active polimerice mixte pe baza de derivati ai carbazolului pentru aplicatii in domeniul celulelor solare	1100000	10.10.2020

3.1. Faze de realizat pe toată durata cercetării:				
Nr. crt.	Luna începere/luna finalizare	Denumire faza	Valoare - lei -	Termen de predare¹
6	Ianuarie/noiembrie	Material nanocompozit pe baza de calcogenic si porfirine hidrofobe pentru senzori de gaze toxice sau explozive	1100000	10.11.2020
7	Ianuarie/decembrie	Structura electronică și magnetică a semiconductorului diluat magnetic MnSi	1100000	10.12.2020
SUBTOTAL anul 2020		34.450.000		
ANUL 2021				
	TEMA 1			
1	Ianuarie/februarie	Profile asimetrice integrabile pentru emularea ecranării vacanțelor profunde în spectroscopia de fotoelectroni	1100000	10.02.2021
2	Ianuarie/martie	Modelare computacionala si teoretica a proprietatilor electronice si dielectrice in heterostructuri si superrețele din oxizi (multi)feroici	1100000	10.03.2021
3	Ianuarie/aprilie	Calculul functiilor de unda quasi-particula relevante in microscopia STM pe nano-structuri.	1100000	10.04.2021
4	Ianuarie/iunie	Controlul proprietatilor ferroelectrice/dielectrice via gradienti de strain in filme subtiri epitaxiale	1100000	10.06.2021
5	Ianuarie/iulie	Proprietatile optice ale compozitelor poli difenil amina si fosforena	1000000	10.07.2021
6	Ianuarie/octombrie	Modele teoretice pentru racirea vibrationala a nanorezonatorilor mecanici in regim cuantic (2021).	1000000	10.10.2021
7	Ianuarie/decembrie	Studierea polarizarii prin calcule numerice in structuri multistrat pentru aplicatii in memorii cu stari multiple	1100000	10.12.2021
	TEMA 2			
1	Ianuarie/februarie	Metode termice si magnetice in optimizarea procesarii de aliaje feritice nanostructurate consolidate prin dispersie de oxizi (ODS)	900000	10.02.2021
2	Ianuarie/martie	Investigarea efectului doparii cu siliciu asupra interactiunilor spin-spin in nanoparticule de $\square$ -Fe ₂ O ₃	1100000	10.03.2021
3	Ianuarie/mai	Dinamica anomala a vortexurilor in monocristale de pnictid dopat isovalent BaFe ₂ (AsxP _{1-x}) ₂	1100000	10.05.2021
4	Ianuarie/iunie	Metode avansate de cartografiere in spatiul direct si spatiul reciproc la scala nanometrica cu fascicul de electroni	1100000	10.06.2021

3.1. Faze de realizat pe toată durata cercetării:				
Nr. crt.	Luna începere/luna finalizare	Denumire faza	Valoare - lei -	Termen de predare¹
5	Ianuarie/iunie	Sinteza titanatului de bismut Bi ₄ Ti ₃ O ₁₂ dopat cu ioni ai pamanturilor rare sub forma de particule cu morfologie de placi	1100000	10.06.2021
6	Ianuarie/iulie	Dinamica moleculara a unor sisteme anizotrope de tip cristal lichid termotrop, in compozite cu semiconductori oxidici sintetizati prin metode ecologice	1000000	10.07.2021
7	Ianuarie/august	Transformari martensitice si transformari induse de campul magnetic in benzi de Fe-Mn-Ga cu memoria formei.	1000000	10.08.2021
8	Ianuarie/septembrie	Influenta micilor deformari ale structurii cristaline asupra proprietatilor magnetice si semimetalice in compusii Heusler	1000000	10.09.2021
9	Ianuarie/octombrie	Studii morfo-structurale si magnetice in sisteme de nanoparticule magnetice cu distributie de forme si dimensiuni bine precizate Responsabil: Andrei Kuncser	1100000	10.10.2021
10	Ianuarie/noiembrie	Influenta elementelor de substitutie asupra transformarii meta-magnetice in aliaje de tip Heusler	1100000	10.11.2021
11	Ianuarie/decembrie	Procese fotocatalitice si hipertermie magnetica in microemulsii inverse Responsabil faza: Dr. Traian Popescu, Dr. Arpad Rostas, Dr. Nicusor Iacob	1000000	10.12.2021
12	Ianuarie/decembrie	Investigarea comparativa a proprietatilor nanostructurilor oxidice de tip 3f-4d procesate diferit: metalurgia pulberilor, respectiv Spark Plasma Sintering (SPS).	1000000	10.12.2021
TEMA 3				
1	Ianuarie/martie	Biocompatibilitatea sistemelor pe baza de matrici de nanofire miez – coaja decorate cu argint	1200000	10.03.2021
2	Ianuarie/aprilie	Sinteza si caracterizarea hidroxiazotatului de zinc, potential fertilizator pentru frunzele plantelor	1200000	10.04.2021
3	Ianuarie/mai	Studii in vivo ale nanoparticulelor de oxid de fier cu aplicatii in tratamentul neoplasmelor.	1200000	10.05.2021
4	Ianuarie/iulie	Realizarea de proteze „scaffold” din materiale bioactive prin printare 3D cu utilizare in ingineria tisulara.	1200000	10.07.2021
5	Ianuarie/iulie	Metoda de determinare a distributiei de masa (m) si sarcina (q) a aerosolilor f(m, q).	1200000	10.07.2021

3.1. Faze de realizat pe toată durata cercetării:				
Nr. crt.	Luna începere/luna finalizare	Denumire faza	Valoare - lei -	Termen de predare¹
6	Ianuarie/septembrie	Funcționalizarea nanoparticulelor de germanat de bismuth cu albumina serică bovină (BSA) și determinarea stresului oxidativ.	1200000	10.09.2021
7	Ianuarie/noiembrie	Evaluarea potențialului sticlelor silicice pentru aplicații în domenii de înaltă tehnologie	1200000	10.11.2021
TEMA 4				
1	Ianuarie/martie	Studiul proprietăților piroelectrice în structuri feroelectrice epitaxiale fără plumb	1200000	10.03.2021
2	Ianuarie/mai	Celule solare pe bază de nanocristale de compuși semiconductori.	1100000	10.05.2021
3	Ianuarie/iunie	Creșterea durabilității celulelor solare perovskite hibride prin încapsulare	1200000	10.06.2021
4	Ianuarie/august	Optimizarea structurilor de acoperiri cu rol de barieră termică depuse prin jet de plasmă cu aplicație în tehnica aeronautică.	1100000	10.08.2021
5	Ianuarie/septembrie	Modularea proprietăților senzitive ale sistemului $(1-x) \text{SnO}_2 - x \text{NiO}$ prin variația domeniului de concentrații ($x = 0.0 - 10.0$) și a condițiilor de sinteză hidrotermală (pH și presiune de vapori)	1100000	10.09.2021
6	Ianuarie/septembrie	Sticle calcogenice de înaltă performanță transparente în domeniul infraroșu pentru vedere nocturnă și termoviziune.	1100000	10.09.2021
7	Ianuarie/octombrie	Creșterea stabilității celulelor prin încapsularea stratului de perovskit de tip MAPbI ₃	1100000	10.10.2021
8	Ianuarie/noiembrie	Studiul filmelor foarte subțiri de cristale ionice.	1100000	10.11.2021
SUBTOTAL anul 2021		37.400.000		
ANUL 2022				
TEMA 1				
1	Ianuarie/februarie	Considerații privind corelația teorie-experiment în cazul feroelectricilor	1100000	10.02.2022
2	Ianuarie/martie	Proprietăților fotoconductoare ale structurilor multistrat de tip ITO/GO/material compozit PPV-grafena /Al și ITO/PEDOT:PSS /material compozit PPV-grafena /Al	1100000	10.03.2022
3	Ianuarie/iunie	Investigații teoretice ale stărilor de margine în sisteme uni și bidimensionale care prezintă tranziții de fază topologice	1100000	10.06.2022
4	Ianuarie/septembrie	Studiul influenței potențialului Zeta asupra fotogenerării de radicali liberi	1100000	10.09.2022

3.1. Faze de realizat pe toată durata cercetării:				
Nr. crt.	Luna începere/luna finalizare	Denumire faza	Valoare - lei -	Termen de predare¹
		de oxigen in suspensii de nanoparticule de TiO ₂ iradiate cu UV		
5	Ianuarie/octombrie	Investigarea proprietatilor fizice ale unor compusi intermetalici monocristalini pe baza de Ce	1100000	10.10.2022
6	Ianuarie/noiembrie	Polarizare de spin, feromagnetism și multifericitate în grafena hidrogenată pe substraturi polarizate	1100000	10.11.2022
	TEMA 2			
1	Ianuarie/martie	Sisteme amorfe multifunctionale flexibile pe baza de tip pamant rar si metal de tranzitie.	1200000	10.03.2022
2	Ianuarie/martie	Straturi subtiri de Al _x In _{1-x} N pentru dispozitive (opto)electronice	1200000	10.03.2022
3	Ianuarie/aprilie	Sinteze de pulberi si filme subtiri de oxizi de vanadiu (simple si dopate)	1200000	10.04.2022
4	Ianuarie/mai	Stari de defecte in oxizi nanocristalini dopati cu metale de tranzitie si cu pamanturi rare.	800000	10.05.2022
5	Ianuarie/iunie	Proprietati electrice ale unor nanostructuri pe baza de SiGeSn controlate morfologic	1200000	10.06.2022
6	Ianuarie/iulie	Sinteza si caracterizarea materialelor 2D calcogenice obtinute prin metoda CVD	1200000	10.07.2022
7	Ianuarie/iulie	Structuri spongioase de PDMS decorat cu TiO ₂ pentru aplicatii de purificare a poluantilor din apa	1200000	10.07.2022
8	Ianuarie/august	Efectul vacantelor de oxigen asupra proprietăților magnetice si feroelectrice in materiale dublu-perovskite, din familia A ₂ TM ₂ O ₆	800000	10.08.2022
9	Ianuarie/august	Sisteme cu nanocristale de GeSn incluse in matrici oxidice pentru aplicatii de senzori optici	1200000	10.08.2022
10	Ianuarie/septembrie	Compozite autoreparabile bazate pe nanotuburi de carbon cu un singur perete si poli furfuril metacrilat obtinute via reactiile Diels-Adler	1200000	10.09.2022
11	Ianuarie/noiembrie	Proprietăți dielectrice ale unor compozite ceramice derivate din pulberi sol-gel	1200000	10.11.2022
12	Ianuarie/decembrie	Straturi subtiri epitaxiale de HfO ₂ dopat, proprietati electrice/feroelectrice	1000000	10.12.2022
	TEMA 3			
1	Ianuarie/februarie	Obtinerea de electrozi modificati cu grafena pentru aplicatii (bio)senzoriale	1200000	10.02.2022

3.1. Faze de realizat pe toată durata cercetării:				
Nr. crt.	Luna începere/luna finalizare	Denumire faza	Valoare - lei -	Termen de predare¹
2	Ianuarie/aprilie	Evaluarea stabilitatii mecanice dentare prin analiza acustica	1300000	10.04.2022
3	Ianuarie/mai	(Bio)senzori de tip tranzistor cu efect de camp avand canal nanofir pentru detectia de ioni de interes fiziologic	1200000	10.05.2022
4	Ianuarie/iulie	Tranzistor cu efect de camp cu canal de grafena și cu poartă lichida pentru detecție folosind mecanisme de recunoaștere biomoleculară	1200000	10.07.2022
5	Ianuarie/septembrie	Obținerea unor straturi subțiri din bioceramici cu proprietati antimicrobiene pentru aplicatii medicale	1300000	10.09.2022
6	Ianuarie/decembrie	Modularea caracteristicilor (nano)-mecanice ale acoperirilor subțiri implantologice.	1200000	10.12.2022
TEMA 4				
1	Ianuarie/martie	Heterostructuri hibride organic-anorganic obtinute prin metoda evaporarii laser pulsate asistata matriceal (MAPLE)	1260000	10.03.2022
2	Ianuarie/aprilie	Procesele de biomineralizare naturala sau indusa de catre organismele unicelulare	1260000	10.04.2022
3	Ianuarie/mai	Optimizarea structurilor de acoperiri cu rol de bariera termica depuse prin jet de plasma cu aplicatie in tehnica aeronautica.	1260000	10.05.2022
4	Ianuarie/iunie	Actuatori pe baza de structuri de PDMS si fibre electrofilate	1260000	10.06.2022
5	Ianuarie/iulie	Sisteme nanodimensionale catalizate pentru stocarea eficienta a hidrogenului in stare solida	1260000	10.07.2022
6	Ianuarie/septembrie	Materiale dielectrice pe baza de niobiu pentru dispozitive pasive de microunde	1210000	10.09.2022
7	Ianuarie/octombrie	Tranzistori ambipolari pe baza de compusi organometalici pe baza de iridium	1360000	10.10.2022
8	Ianuarie/octombrie	Studiul materialelor utilizate in coloristica ceramicii si arhitecturii neolitice din epoca bronzului in Romania	1360000	10.10.2022
9	Ianuarie/noiembrie	Dezvoltarea unei platforme de achizitie a semnalului de la dispozitive de tip senzor bazat pe nanostructuri	1360000	10.11.2022
10	Ianuarie/decembrie	Capacitori MOS cu proprietati de memorie imbunatatite controlate de compozitia si morfologia centrilor de stocare de sarcina	1360000	10.12.2022

3.1. Faze de realizat pe toată durata cercetării:				
Nr. crt.	Luna începere/luna finalizare	Denumire faza	Valoare - lei -	Termen de predare¹
SUBTOTAL anul 2022		40.350.000		
TOTAL GENERAL			144.300.000	

3.2. Costuri totale estimative pentru întreaga perioadă (lei), din care:	Anul 2019	Anul 2020	Anul 2021	Anul 2022	Total
1	2	3	4	5	6=2+3+4+5
3.2.1. Salarii și contribuții	16150000	16825000	18190000	19375000	70540000
3.2.2. Cheltuieli materiale și servicii	1000000	1200000	1500000	1500000	5200000
3.2.3. Deplasări	10000	10000	10000	10000	40000
3.2.4. Cheltuieli indirecte (regie)	11940000	12415000	13700000	14465000	52520000
3.2.5. Cheltuieli de capital	3000000	4000000	4000000	5000000	16000000
TOTAL GENERAL	32100000	34450000	37400000	40350000	144300000

4. RESURSE UMANE²

	Total personal:	din care:	
		Studii superioare:	Personal auxiliar:
Om / luna	12500	10500	2000
Număr	265	215	50

La realizarea programului Nucleu va participa intregul personal al INCDFM, compus din **265** salariați, dintre care **215** (~81 %) cu studii superioare si 50 cu studii medii. Personalul de cercetare cu studii superioare direct implicat in realizarea programului cuprinde: 29 CS1; 25 CS2; 38 CS3; 21 CS; 34 de ACS; 2 IDT3 si 2 IDT in total **151 de cercetatori si ingineri dezvoltare** (~70 % din personal cu studii superioare). Din personalul de cercetare, **128 de persoane detin titlul de doctor** (~87 % din total cercetatori). Cercetatorii implicati in

² La proiectele din programul-nucleu participă numai personalul propriu angajat permanent.

realizarea fazelor de executie ale programului Nucleu au specializari diverse (Fizica, Chimie, Stiinta Materialelelor, Inginerie electrica, Automatizari, Biologie, etc.), ceea ce permite abordarea de teme multidisciplinare complexe. La acestia se adauga personal tehnic (ingineri si tehnicieni) necesar pentru intretinerea infrastructurii de cercetare si pentru dezvoltarea de aplicatii, si personalul administrativ, care asigura serviciile generale financiar-contabile, de achizitii, de personal, juridice, de marketing, de relatii publice, de securitate, etc..

Echipa de management a proiectului va fi alcatuita din cercetatori reputati precum si din specialisti in administrarea proiectelor si in finante-contabilitate:

Dr. Lucian Pintilie, Director Stiintific, CS1-director de proiect

Dr. Valeriu Moldoveanu, Sef de Laborator, CS1-responsabil stiintific tema 1

Dr. Victor Kuncser, Sef de Laborator, CS1-responsabil stiintific tema 2

Dr. Silviu Polosan, Sef de Laborator, CS1-responsabil stiintific tema 3

Dr. Cristian Mihail Teodorescu, Presedinte Consiliu Stiintific, CS1-responsabil tema 4

Ec. Gabriela Ivanus, Director Economic-responsabil financiar contabil

Ec. Elena Jelea-responsabil derulare contract (contractare, predari faze, etc.)

Echipa de management va fi ajutata de ceilalti responsabili de servicii si compartimente pentru buna desfasurare a activitatilor pe partea de achizitii, publicitate si marketing, resurse umane, etc.

5. REZULTATE ESTIMATE, VALORIFICARE

5.1. Rezultate estimate:

Tematicile prezentului proiect au caracter de cercetare atat fundamentala cat si aplicativa (industrială), deci estimam o crestere a nivelului de cunostiinte generale de fizica si tehnologia materialelor avansate, straturilor subtiri, multistraturilor, interfetelor, nanostructurilor si nanocompozitelor cu diverse proprietati si cu aplicatii diverse in domenii prioritare si de specializare inteligenta, precum si o crestere a numarului si calitatii de materiale noi cu aplicatii industriale si a impactului tehnologic al acestora pentru conectarea mai puternica cu diversi parteneri industriali.

Se are in vedere:

- Dezvoltarea de concepte, teorii, procese si fenomene in materia condensata.
- Implementarea de noi tehnici si tehnologii de crestere a materialelor nanostructurate, a straturilor subtiri si interfetelor; optimizarea parametrilor de crestere a diverselor material in cadrul tehnicilor si tehnologiilor deja implementate in institute
- Implementarea de noi tehnici, si optimizarea celor existente, pentru caracterizari exhaustive ale materialelor studiate
- Descoperirea de noi materiale, structuri si arhitecturi de interes stiintifico-tehnologic, precum si optimizarea/imbunatatirea celor deja existente
- Rezultate stiintifice noi privitoare la concept, teorii, procese si fenomene in materia condensata, in interfete/supraretile si in diverse tipuri de nanostructuri cu dimensionalitate redusa
- Rezultate stiintifice si tehnologice brevetabile si aplicabile in practica
- Publicarea in reviste de circulatie international si comunicarea rezultatelor la diverse evenimente stiintifice din tara si strainatate

5.2. Efecte ale aplicării rezultatelor estimate prin:

- Cresterea potentialului de cercetare, dezvoltare si inovare al INCDFM
- Sporirea atractivitatii institutului ca partener pentru universitati, institute de cercetare-dezvoltare, IMM-uri, intreprinderi economico-industriale mari, din tara si din strainatate
- Cresterea calitatii cercetarii in INCDFM si a vizibilitatii externe a rezultatelor cercetarii
- Dezvoltarea de colaborari internationale si formarea de retele de cercetare la nivel global sau european in diverse domenii de interes din cadrul tematicii proiectului

- Cresterea rolului de actor major in domeniul materialelor avansate, straturilor subtiri, interfetelor si nanostructurilor pe care il are INCDFM in Europa Centrala si de Est
- Ridicarea nivelului de calificare si specializare al masteranzilor, doctoranzilor si tinerilor cercetatori
- Stabilizarea tinerilor cercetatori valorosi in institut, favorizarea revenirii in tara a tinerilor cercetatori valorosi pentru inversarea fenomenului de brain-drain
- Propuneri de proiecte in cadrul programului Orizont 2020, a altor programe ale UE, precum si a unor programe bi-/multi-nationale cu finantare internationala
- Imbunatatirea diseminarii rezultatelor stiintifice si tehnologice prin publicatii in reviste internationale cu impact mare, prin participari la conferinte internationale, si prin o mai buna informare a posibililor parteneri industriali si a publicului larg

5.3. Principalul grup țintă al rezultatelor cercetării:

- Comunitatea stiintifica, tehnica si din invatamantul superior, din tara si din strainatate (vezi Cap. 6)
- Intreprinderi mici si mijlocii, intrprinderi mari, multinationale, beneficiari/parteneri/colaboratori actuali sau posibili beneficiary/parteneri/colaboratori: S.C. Honeywell Romania, RATEN Pitesti, SC UZUC Ploiesti, ELJ Automotive S.A., ABB Elvetia, InterNET, SC OMEGA PROFESIONAL SRL, SC R&D Consultanta si Servicii SRL, SC ProOptica SA, SC PurTech SRL, AUTOLIV ROMANIA S.R.L., S.C. HIDROJET S.A., OERLIKON SOLAR Ltd. (Elvetia), SC MATRA SYSTEMS, SC AMS 2000 TRADING, SC. DOZIMED SRL, INFRATEC (Germania), Optoelectronica 2001, Electrica, Green Energy, Enel Green Power, Cofra, Iberdrola, CEZ, TehnoSat, Dacia Renault Pitesti, Ford Craiova, Softronic Craiova, PlasmaJet, R & D, METAV S.A, Ecotranstech. Pentru atragerea mediului privat in sensul valorificarii rezultatelor cu potential aplicativ vor fi organizate seminarii si workshopuri tematice cu prezentare de demonstratori functionali.

5.4. Efecte socio-economice estimate:

Programul Horizon 2020 al UE mentioneaza angajamentul societatii pentru dezvoltarea stiintei si inovarii, care se face cu si pentru societate, inclusiv prin incurajarea dialogului dintre oamenii de stiinta si cetateni/organizatii, in special in domenii care induc controverse, prin promovarea aderarii la standardele etice, prin dezvoltarea unor cai mai bune de accesare a rezultatelor stiintei de catre toti cetatenii europeni, si nu numai (vezi cresterea importantei date diseminarii tip Open Access)

In acest sens, activitatea de cercetare, dezvoltare si inovare propusa in prezentul proiect va isi propune sa conduca si la urmatoarele efecte socio-economice

- Cresterea recunoasterii internationale a stiintei si tehnologiei romanesti, precum si a valorii si vizibilitatii cercetatorilor romani
- Cresterea atractivitatii carierelor stiintifice si tehnice pentru tinerii studenti de valoare
- Realizarea de teze da Masterat si Doctorat de valoare in domeniile proiectului
- Reducerea consumului de energie prin imbunatatirea proceselor de fabricatie si a folosirii de dispozitive, echipamente si materiale avansate
- Protectia mediului prin promovarea tehnologiilor si produselor „eco-friendly”
- Imbunatatirea nivelului de sanatate a oamenilor
- Promovarea egalitatii de sex
- Oferirea de sanse tinerei generatii

In concordanta cu politicile UE si cu legislatia nationala, prezentul proiect respecta principiile:

Poluatorul plateste (entitatea care a produs poluarea suporta pagubele aduse mediului). Prezentul proiect respecta toate cerintele principiului “poluatorul plateste”; de asemenea, isi propune sa contribuie activ la reducerea poluarii, o mare parte din rezultatele sale fiind in relatie directa cu economisirea de energie, reflectata in reducerea de noxe si gaze responsabile de schimbarile climatice asociate cu producerea energiei din combustibili fosili. Ca un alt exemplu, explozia unui transformator electric clasic racit cu ulei duce la poluarea solului si aerului cu vapori de ulei de racire, in timp ce explozia unui transformator cu cabluri supraconductoare racite cu azot lichid duce doar la dispersarea vaporilor de azot in aer (care este compus in proportie de 78% din azot). parcursul derularii proiectului, se vor folosi substante chimice pentru procesele de fabricatie, fotolitografie, precursori de depunere, agenti de curatare etc. Achizitia acestor substante si folosirea lor se va face cu respectarea normelor de protectia muncii si a mediului inconjurator in vigoare, iar evacuarea lor se va face angajand firme specializate de profil, cu plata din regie. In ceea ce priveste protectia la radiatii, trebuie mentionat ca toate echipamentele sunt proiectate

astfel incat sa nu periclitaze personalul care asigura functionarea. Fasciculele de raze X, de electroni si ioni cu care opereaza difractometrele, microscopul electronice si FIB sunt confinate in incinte inchise si securizate.

Dezvoltare durabila (satisfacerea nevoilor prezentului fara a periclita capacitatea de a-si satisface nevoile a generatiilor viitoare). Conservarea resurselor, combaterea si diminuarea poluarii mediului rezulta in mod natural din impactul direct si indirect al noilor materiale avansate si al tehnologiilor de obtinere a acestora. In acest sens, dezvoltarea de materiale noi, care incorporeaza inteligenta si au plus-valoare mare satisface criteriile majore ale activitatilor economice sustenabile aducand beneficii majore societatii in ansamblul ei. Cercetarea interdisciplinara (fizica, chimie, nanotehnologii, inginerie, etc) de materiale reprezinta un domeniu de baza in care se ilustreaza schimbarea de paradigma de la activitati economice bazate pe exploatarea intensiva a resurselor la activitati bazate pe cunoastere. Dezvoltarea durabila insemna si transformarea Romaniei dintr-o tara exportatoare de forta de munca (inclusiv de inalta calificare) intr-o tara importatoare de forta de munca inalt calificata. Conditiiile existente, inclusiv in domeniul cercetarii, nu sunt inca de natura sa stimuleze ramanerea in tara a personalului de inalta calificare, astfel incat fenomenul de "brain-drain" inca este semnificativ.

Egalitatea de sanse. Desi s-a considerat mult timp ca stiintele exacte si ingineresti sunt mai mult apanajul barbatilor, INCDFM are o traditie indelungata in cea ce priveste egalitatea de sanse intre sexe, ce se reflecta pana la nivelul maxim de competente atinse, academicienii Margareta Giurgea si Rodica Manaila. In acest moment, din circa 260 de angajati, aproape jumatate sunt femei, acelasi procent fiind si in cazul personalului de cercetare. Din personalul de conducere in structura actuala: Directorul General, Directorul Stiintific sunt barbati, iar Directorul Economic si Presedintele Consiliului Stiintific sunt femei. De asemenea, in INCDFM nu sunt practicate discriminari pe baza de etnie sau religie. Politica de nediscriminare este asumata de INCDFM din toate punctele de vedere, singurele criterii care au stat in timp la baza angajarii, promovarii si salarizarii fiind competenta si performanta profesionala. Regulamentele de promovare sunt clare, in acord cu prevederile la nivel national, cu factori de performanta cuantificati. Se incearca in permanenta crearea unui climat favorabil pentru tinerii cercetatori, care sa le asigure acestora posibilitati optime de dezvoltare profesionala si personala. Angajarile se fac doar prin concurs, cu subiecte comune, astfel incat ierarhizarea candidatilor se face doar pe baza competentelor demonstrate.

5.5 Modul de diseminare a rezultatelor obtinute:

Diseminarea rezultatelor se va face prin prezentarea proiectului si a rezultatelor obtinute in cadrul acestuia utilizand cailile de comunicare specifice domeniului de cercetare-dezvoltare, insa fara a se rezuma la acestea, respectiv: seminarii, prezentari, lectii invitate, conferinte, congrese, schimburi de experienta, publicari in reviste si jurnale de specialitate, publicare pe pagina de internet a INCDFM, etc.. In mod special se va acorda atentie la:

- Publicarea rezultatelor in reviste internationale de specialitate cu factor de impact cat mai ridicat
- Organizarea anuala a workshopului IWAP, cu invitati de prestigiu din tara si strainatate
- Co-organizarea unor conferinte internationale in Romania, precum ROCAM
- Prezentarea rezultatelor la congrese si conferinte internationale de renume
- Popularizarea rezultatelor celor mai interesante, in special a celor cu potential aplicativ sau a celor cu o larga apreciere international, pe pagina web a INCDFM, pe blogul INCDFM, precum si in presa scrisa si audio-video
- Organizarea de evenimente tematice adresate tinerilor elevi si studenti (ex. Noaptea Cercetatorului)
- Prezentarea rezultatelor cu potential aplicativ la targuri si expozitii de profil

5.6 Modul de valorificare a rezultatelor estimate:

Rezultatele stiintifice obtinute in cadrul prezentului proiect care privesc sinteza si functionalitatea materialelor avansate sub forma masiva, de straturi subtiri, multistraturi, sau nanostructuri vor fi valorificate prin publicare in reviste internationale de prestigiu cu factor de impact ridicat, si vor fi diseminate la conferinte internationale importante cu participare numeroasa.

Tehnologiile noi, noile materiale avansate si nanostructuri cu proprietati noi vor fi brevetate. Se are in vedere si brevetarea unor tehnologii noi de aplicare a acestor materiale noi cu impact, precum si transferul de tehnologie catre potentiali utilizatori. O alta posibilitate de valorificare a rezultatelor estimate este infiintarea de IMM-uri de tip „start-up” sau „spin-off”.

Fiind un proiect care contine si activitati de cercetare aplicativa , un accent deosebit va fi pus pe contactarea firmelor potential interesate in rezultatele cercetarilor. In acest sens, se propune si organizarea unor seminarii speciale la care sa fie invitati potentialii utilizatori, seminarii la care sa se prezinte rezultatele aduse la nivel de demonstrator si sa se discute posibile colaborari in directia transferului tehnologic. Intentia este ca cel putin 2-3 materiale sau structuri cu potential de utilizare in senzoriala sau energetica sa fie valorificate la nivel de demonstrator si propuse unor firme cu activitate in domeniile respective precum Honeywell (cu care exista o colaborare deja de durata), Continental sau Altius Fotovoltaic.

5.7 Protecția proprietății intelectuale:

În situația în care pe perioada derulării proiectului se vor obține rezultate eligibile pentru protecție prin unul sau mai multe drepturi de proprietate industrială, autorii vor informa fără întârziere directorul de proiect și ceilalți membrii ai echipei de management pentru a se hotărâ în comun modalitatea cea mai potrivită de protecție a respectivului rezultat și vor decide dacă să le protejeze sau nu. Cheltuielile de depunere, acordare și menținere a brevetelor și extinderea corespunzătoare, indiferent de natura acestora, vor fi convenite în acord cu legislația în vigoare. În plus, proprietarul se angajează sau sunt de acord: (a) inventatorii sau co-inventatorii vor fi numiți pentru astfel de brevete și cereri în conformitate cu prevederile legale în vigoare; (b) cercetătorii, nominalizați ca inventatori, vor furniza toate semnăturile și vor îndeplini toate formalitățile necesare pentru depunerea, menținerea și protejarea respectivelor brevete sau orice alt drept de protecție; (c) va analiza oportunitatea de remunerare suplimentară a inventatorilor respectivi în conformitate cu prevederile legale în vigoare.

5.6 Aportul rezultatelor la îndeplinirea obiectivelor stabilite în Strategia proprie a instituției, respectiv la SNCDI 2014-2020:

Structurarea direcțiilor strategice de cercetare din strategia proprie 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 investigații teoretice cu cercetare experimentală pentru verificarea unor modele/ipoteze și demonstrarea viabilității noilor soluții, în cazul de față în domeniul fizicii stării condensate, al 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, sunt propuse următoarele direcții tematice de cercetare pentru perioada următoare:

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 formarea profesională avansată în fizică și domenii conexe

Cuprinde partea de cercetare fundamentală cu activități specifice: a) validare de concepte și idei prin studii teoretice, tehnici avansate de modelare numerică și experimente dedicate; b) înțelegerea mecanismelor și proceselor fizice indispensabile prezicerii și controlului unor proprietăți de material și regimuri de funcționare. Se au în vedere studii complexe în domenii relevante atât din punct de vedere fundamental dar și cu potențial cert pentru aplicații: fenomene la scară nano în materiale feroice, materiale 2D și nanodispozitive, fenomene optice neliniare, fizica suprafețelor și interfețelor, înțelegerea și simularea rolului defectelor structurale asupra fenomenelor fizice, etc.). Rezultatele vor constitui cunoaștere premergătoare pentru direcția 2 din prezenta strategie, în primul rând, ajutând la proiectarea și realizarea de noi materiale și structuri funcționale, dar și pentru direcțiile 3 și 4, orientate către aplicații mai punctuale în domeniile de specializare inteligentă cărora le sunt adresate.

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 direcțiilor 3 și 4, după ce se stabilește care este potențialul pentru aplicații și nisa din economie care oferă o valorificare maximă a rezultatelor cercetării.

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

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

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

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

Prezentul proiect isi aduce contributia la realizarea strategiei de cercetare a INCDFM pentru perioada 2019-2022, respectiv la obtinerea de rezultate concrete in cadrul temelor prevazute in strategie.

In ceea ce priveste raportarea la SNCDI 2014-2020, prezentul proiect contribuie la implementarea urmatoarelor specializari inteligente sau domenii prioritare la nivel national:

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

Prin domeniul sau de activitate, INCDFM se incadreaza perfect in aceasta specializare inteligenta. Materialele avansate functionale constituie baza aplicatiilor de inalta tehnologie din industrii de varf precum electronica, transporturi, energetica, aparare, etc. La nivel mondial se fac eforturi in cercetarea pe cateva directii principale: 1) miniaturizarea anumitor componente electronice ceea ce implica studiul efectelor de dimensiune in materiale functionale; 2) generarea si caracterizarea de sisteme cu dimensionalitate redusa si cu functionalitati utile in aplicatii high-tech (ex. gaz 2D de electroni la interfete; sisteme 2D similare grafenei, nanofire, etc.); 3) reducerea amprenteii de carbon a tehnologiilor utilizate in obtinerea materialelor avansate si a aplicatiilor aferente lor; 4) inlocuirea materialelor deficitare cu altele abundente in natura; 5) scaderea costurilor de productie a materialelor cu scopul de a face anumite aplicatii accesibile pentru cat mai multa lume (ex. „casa verde”); 6) dezvoltarea de sisteme inteligente de tip „cladire inteligenta” sau „oras inteligent”, care necesita materiale avansate pentru senzori, comunicatii, stocare de date, etc.

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

Si la aceasta specializare inteligenta INCDFM isi poate aduce contributia dezvoltand materiale si aplicatii pentru comunicatii fara fir in special in cazul tehnologiilor bazate pe microunde, pentru prelucrarea si stocarea informatiei (memorii nevolatile), pentru diferite tipuri de senzori utilizabili in aplicatii de securitate (in special in domeniul CBRNE detectie de substante interzise, protectie de perimetre, etc.) sau de spatiu (ex. detectie de IR, microunde, etc.)

- **ENERGIE, MEDIU ȘI SCHIMBĂRI CLIMATICE**

Este un domeniu relansat in INCDFM in ultimii ani. Se pot aduce contributii considerabile pe urmatoarele directii: 1) surse regenerabile de energie, cum ar fi celule solare pe baza de efect fotovoltaic folosind materiale noi, abundente in natura si tehnologii de cost redus; celule de combustie bazate pe electroliti solizi; 2) materiale pentru stocare de energie cum ar fi nanocompozite pentru

supercapacitori si baterii cu timp de viata indelungat si capacitate mare de stocare de sarcina electrica sau materiale pentru stocare de hidrogen; 3) materiale pentru reactoare nucleare de fisiune sau fuziune (in stransa relatie cu proiectul ITER) 4) (bio) senzori pentru monitorizarea poluarii, inclusiv pentru prevenirea utilizarii in exces a pesticidelor si ierbicidelor (aici se poate face legatura si cu domeniul de specializare inteligenta intitulat BIOECONOMIE)

- **SĂNĂTATE**

Exista expertiza si intentia ferma de a continua dezvoltarea cercetarilor in domeniul materialelor biocompatibile, al nanomaterialelor utilizate in livrarea controlata a medicamentelor, precum si in dezvoltarea de materiale pentru senzori cu aplicatii in medicina. Cercetarile dezvoltate in institut acopera componente importante din domeniul materialelor cu aplicatii in sanatate, incluzand dezvoltarea de materiale biocompatibile si de metode de fabricare a acestora pentru implanturi si proteze, materiale micro si nanostructurate pentru pansamente inteligente, materiale pentru biosenzori portabili folositi pentru monitorizarea starii de sanatate. Este un domeniu interdisciplinar care, pentru a se dezvolta cu sanse reale de succes in competitii de proiecte, necesita asamblarea unor echipe complexe de fizicieni, ingineri, chimisti, biologi si intarirea colaborarilor cu unitati medicale pentru efectuarea testelor specifice.

- **TEHNOLOGII NOI ȘI EMERGENTE**

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

- **CERCETARE FUNDAMENTALA SI DE FRONTIERA**

Este un domeniu prioritar la nivel national care intersecteaza toate celelalte specializari inteligente sau prioritati nationale. Practic, orice cercetare incepe cu studii fundamentale, la granita cunoasterii actuale, pentru a intelege noi fenomene, a dezvolta modele predictive pentru sinteza de noi materiale si structuri, sau pentru a previziona modul in care diferite aplicatii raspund la modificari ale stimulilor externi. Cercetarea fundamentala este cea care ofera cunoasterea necesara pentru avansul catre aplicatii concrete. Si aici INCDFM poate aduce contributii determinante in intelegerea fenomenelor fizice la nano-scala, la nivelul suprafetelor (cataliza si foto-cataliza) sau al interfetelor (proprietati derivate din imparitate de sarcina la interfete, inginerie de stress mecanic, etc.), precum si la intelegerea interactiei dintre materia sub diferite forme, in special solida, si diferite forme de radiatii sau constrangeri de mediu (temperaturi foarte ridicate sau foarte joase, presiuni mari sau mici).

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

Pe langa SNCDI 2014-2020 prezentul proiect poate aduce contributii importante la:

STRATEGIA NAȚIONALĂ PENTRU COMPETITIVITATE 2014 – 2020

Strategia Regionala de Inovare Bucuresti-Ilfov

Strategii/planuri de mobilitate urbana

Strategiile Regionale de Inovare Sud-Muntenia si Sud-Oltenia

Orasul inteligent

Strategia Națională de Sănătate 2014-2020

Strategia energetica a Romaniei

Materialele avansate functionale sunt cheia aplicatiilor de inalta tehnologie, fara de care societatea contemporana nu poate fi conceputa. Prin dezvoltarea de materiale mai robuste, din componente mai abundente in natura si utilizand tehnologii de cost mai redus si cu amprenta nociva mai mica asupra mediului, prezentul proiect contribuie la rezolvarea unor probleme societale de interes global cum ar fi incalzirea globala, protejarea resurselor, dezvoltare durabila pentru toti.

Nu in ultimul rand, aplicatiile ce pot fi dezvoltate pe baza materialelor sintetizate in cadrul proiectului pot contribui si la strategia de securitate a tarii, in sensul specializarii inteligente „Spatiu si securitate” care prevede dezvoltarea de noi metode de preventie a crimei organizate, terorismului, etc. Acestea necesita senzori sofisticati si sensibili si metode avansate de analiza fizico-chimica care au la baza materiale functionale.

6. ALTE INFORMATII CARE SUSTIN PROIECTUL

Oferta este susținută în plus prin probarea capacității și credibilității individuale a participanților la proiect. Expertiza participanților la proiect este remarcabilă, așa cum se poate vedea și din rapoartele de activitate ale INCDFM pe ultimii ani (<http://www.infim.ro/page/annual-reports>).

În plus oferta este susținută de acțiunile de cooperare internațională a căror listă o prezentăm aici. Menționăm că fiecare din cele 4 ținte menționate la punctul 2.1 este acoperită de colaborări internaționale în funcțiune. Contribuția acestui parteneriat constă în accesul la aparatură de înaltă performanță care lipsește în țară, și în redactarea în comun a unor lucrări științifice, ceea ce facilitează accesul cercetării românești pe piața internațională a producției științifice.

Proiectul se bazează pe o serie de colaborări naționale și internaționale care permit accesul la infrastructuri complementare celor din INCDFM, precum și colaborare pe domenii de interes pentru INCDFM prin depunerea de aplicații comune de proiecte la programe cu finanțare națională sau internațională, sau prin publicații comune.

COLABORARI INTERNATIONALE

- CERN RD50 “Radiation hard semiconductor devices for very high luminosity colliders”

Radboud University Nijmegen (Olanda)

Universiteit Twente (Olanda)

Twente Solid State Technology (Olanda)

“Martin Luther“ Universität Halle Wittenberg (Germania)

Universität Konstanz (Germania)

Max Planck Gesellschaft zur Förderung der Wissenschaften E.V. (MPI-HALLE) (Germania)

Forschungszentrum Jülich GmbH (Germania)

Georg August Universität Göttingen (Germania)

University of Glasgow (Marea Britanie)

Centro Ricerche Fiat SCPA (Italia)

Institute for Nanostructured Materials Bologna (Italia)

Universiteit Antwerpen (Belgia)

Paul Scherrer Institut (Elvetia)

IBM Research GMBH (Elvetia)

Intel Performance Learning Solutions Limited Irlanda)

Holy Trinity College Dublin (Irlanda)

Service de Physique et Chimie des Surfaces et Interfaces, Institut Rayonnement Matière Saclay, Commissariat à l'Energie Atomique (Franta)
 ELETTRA (Trieste) Synchrotron (Italia)
 Institut des Matériaux Jean Rouxel, Nantes (Franta)
 Normal University of Beijing (China)
 Institut de Physique et Chimie des Matériaux de Strasbourg (Franta)
 Universitatea din Oslo (Norvegia)
 University of Oulu (Finlanda)
 Universitatea Tehnica Darmstadt (Germania)
 UMP CNRS-Thales a& Université Paris-Sud (Franta)

COLABORARI STIINTIFICE IN TARA

Universitatea din Bucuresti: Facultatea de Fizica; Facultatea de Chimie; Facultatea de Biologie; Facultatea de Geografie
 Universitatea Politehnica din Bucuresti: Facultatea de Chimie Industrială; Facultatea de Știință și Ingineria Materialelor; Facultatea de Inginerie Mecanică și Mecatronică; Facultatea de Inginerie și Managementul Sistemelor Tehnologice; Facultatea de Transporturi; Facultatea de Inginerie Aerospațială
 Universitatea din Iasi: Facultatea de Fizica, Facultatea de Chimie
 Universitatea Tehnica din Iasi, Gh. Asachi: Facultatea de Electrotehnica; Facultatea de Ingineria Mediului
 Universitatea Babes Bolyai din Cluj: Facultatea de Fizica, Facultatea de Chimie
 Universitatea Tehnica din Cluj: Facultatea de Construcții de Mașini; Facultatea de Știința și Ingineria Materialelor; Facultatea de Mecanică
 Universitatea de Medicina și Farmacie Carol Davila
 Universitatea de Vest din Timisoara, Facultatea de Fizica .
 INCDFizica și Inginerie Nucleara Horia Hulubei
 INCDFizica Laserilor, Plasmei și Radiațiilor
 INCDFizica pentru Optoelectronică,
 INCDFizica pentru Microtehnologie;
 INCDFizica pentru Optoelectronică;
 INCDFizica pentru Științe Spatiale
 INCDFizica pentru Metale Neferoase și Rare
 INCDFizica Tehnologii Izotopice și Moleculare Cluj Napoca
 Institutul de Chimie Fizică "I.G. Murgulescu" București
 Institutul de Chimie Macromoleculară "Petru Poni" Iași
 Sucursala Timisoara a Academiei Romane

Capacitatea INCDFM de a disemina rezultatele la cel mai înalt nivel este susținută de sinteza publicațiilor din 2018, conform tabelului de mai jos:

Titlu Jurnal	Nr. articole	FI jurnal	FI total
APPLIED SURFACE SCIENCE	12	4.439	53.268
CERAMICS INTERNATIONAL	8	3.057	24.456
SCIENTIFIC REPORTS	5	4.122	20.61
MATERIALS	4	2.467	9.868
BEILSTEIN JOURNAL OF NANOTECHNOLOGY	3	2.968	8.904
CATALYSIS TODAY	3	4.667	14.001
JOURNAL OF APPLIED PHYSICS	3	2.176	6.528
JOURNAL OF NON CRYSTALLINE SOLIDS	3	2.488	7.464
JOURNAL OF SUPERCONDUCTIVITY AND NOVEL MAGNETISM	3	1.142	3.426
MATERIALS CHEMISTRY AND PHYSICS	3	2.210	6.63
OPTICAL MATERIALS	3	2.320	6.96
SENSORS AND ACTUATORS B CHEMICAL	3	5.667	17.001
THIN SOLID FILMS	3	1.939	5.817
ACS APPLIED MATERIALS INTERFACES	2	8.097	16.194
ACS SUSTAINABLE CHEMISTRY ENGINEERING	2	6.140	12.28
COMPTES RENDUS CHIMIE	2	1.877	3.754
JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS	2	3.779	7.558

JOURNAL OF MATERIALS SCIENCE	2	2.993	5.986
JOURNAL OF PHYSICS D APPLIED PHYSICS	2	2.373	4.746
JOURNAL OF THERMAL ANALYSIS AND CALORIMETRY	2	2.209	4.418
MATERIALS RESEARCH EXPRESS	2	1.151	2.302
MATERIALS SCIENCE IN SEMICONDUCTOR PROCESSING	2	2.593	5.186
NANOSCALE	2	7.233	14.466
PHYSICA STATUS SOLIDI B BASIC SOLID STATE PHYSICS	2	1.729	3.458
PHYSICAL REVIEW B	2	3.813	7.626
SOLAR ENERGY	2	4.374	8.748
2D MATERIALS	1	7.042	7.042
ACS NANO	1	13.709	13.709
ACS OMEGA	1	0	0
ACTA MATERIALIA	1	6.036	6.036
ANNALES HENRI POINCARÉ	1	1.740	1.74
APPLIED PHYSICS A MATERIALS SCIENCE PROCESSING	1	1.604	1.604
APPLIED PHYSICS LETTERS	1	3.495	3.495
BIOMACROMOLECULES	1	5.738	5.738
CARBON	1	7.082	7.082
CATALYSIS COMMUNICATIONS	1	3.463	3.463
CATALYSIS SCIENCE TECHNOLOGY	1	5.365	5.365
CHEMICAL GEOLOGY	1	3.570	3.57
CHEMICAL PAPERS	1	0.963	0.963
CHEMICAL PHYSICS LETTERS	1	1.686	1.686
COATINGS	1	2.350	2.35
CORROSION SCIENCE	1	4.862	4.862
CRYSTALS	1	2.144	2.144
DIGEST JOURNAL OF NANOMATERIALS AND BIOSTRUCTURES	1	0.673	0.673
ELECTROCHIMICA ACTA	1	5.116	5.116
EUROPEAN PHYSICAL JOURNAL PLUS	1	2.240	2.24
FRONTIERS IN CHEMISTRY	1	4.155	4.155
FUSION ENGINEERING AND DESIGN	1	1.437	1.437
GREEN CHEMISTRY	1	8.586	8.586
IEEE TRANSACTIONS ON APPLIED SUPERCONDUCTIVITY	1	1.288	1.288
INORGANICA CHIMICA ACTA	1	2.264	2.264
INTERNATIONAL JOURNAL OF ENVIRONMENTAL SCIENCE AND TECHNOLOGY	1	2.037	2.037
JOURNAL OF ADVANCED CERAMICS	1	1.605	1.605
JOURNAL OF ELECTRONIC MATERIALS	1	1.566	1.566
JOURNAL OF INORGANIC AND ORGANOMETALLIC POLYMERS AND MATERIALS	1	1.754	1.754
JOURNAL OF LUMINESCENCE	1	2.732	2.732
JOURNAL OF MATERIALS CHEMISTRY A	1	9.931	9.931
JOURNAL OF MOLECULAR LIQUIDS	1	4.513	4.513
JOURNAL OF PHYSICS AND CHEMISTRY OF SOLIDS	1	2.207	2.207
JOURNAL OF THE ELECTROCHEMICAL SOCIETY	1	3.662	3.662
JOURNAL OF THE MECHANICAL BEHAVIOR OF BIOMEDICAL MATERIALS	1	3.239	3.239
MATERIALS CHARACTERIZATION	1	2.892	2.892
MATERIALS HORIZONS	1	13.183	13.183
MATERIALS RESEARCH BULLETIN	1	2.873	2.873
METALS	1	1.704	1.704
MICROPOROUS AND MESOPOROUS MATERIALS	1	3.649	3.649
MODELLING AND SIMULATION IN MATERIALS SCIENCE AND ENGINEERING	1	1.793	1.793
MOLECULAR CATALYSIS	1	0	0
NANOMATERIALS	1	3.504	3.504
NATURE COMMUNICATIONS	1	12.353	12.353

NUCLEAR INSTRUMENTS METHODS IN PHYSICS RESEARCH SECTION A ACCELERATORS SPECTROMETERS DETECTORS AND ASSOCIATED EQUIPMENT	1	1.336	1.336
PHILOSOPHICAL MAGAZINE	1	1.632	1.632
PHYSICA STATUS SOLIDI RAPID RESEARCH LETTERS	1	3.721	3.721
PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS	1	3.906	3.906
PHYSICAL REVIEW A	1	2.909	2.909
PHYSICAL REVIEW APPLIED	1	4.782	4.782
POLYHEDRON	1	2.067	2.067
POLYMERS	1	2.935	2.935
PROCEEDINGS OF THE ROMANIAN ACADEMY SERIES A MATHEMATICS PHYSICS TECHNICAL SCIENCES INFORMATION SCIENCE	1	1.752	1.752
ROMANIAN JOURNAL OF INFORMATION SCIENCE AND TECHNOLOGY	1	0.288	0.288
ROMANIAN JOURNAL OF PHYSICS	1	1.433	1.433
ROYAL SOCIETY OPEN SCIENCE	1	2.504	2.504
SENSORS	1	2.475	2.475
SUPERCONDUCTOR SCIENCE TECHNOLOGY	1	2.861	2.861
VACUUM	1	2.067	2.067
TOTAL FI	141		490.128

Se constata ca aproximativ 50 % din lucrari sunt publicate in jurnale cu factor de impact mai mare sau egal cu 3, iar 3 lucrari sunt publicate in jurnale cu factor de impact peste 10, dintre care una in Nature Communications.

Mai jos este o selectie de publicatii care sustin fezabilitatea proiectului:

Nr	Titlul articolului	Numele Jurnalului, Volumul, pagina nr.	Nume Autor	AIS	Factor de impact FI	Quartila in care se situeaza
1	Hierarchical functionalization of electrospun fibers by electrodeposition of zinc oxide nanostructures	<i>APPLIED SURFACE SCIENCE</i> , 458 , pp.555-563	Matei, E; Busuioc, C; Evangelidis, A; Zgura, I; Enculescu, M; Beregoi, M; Enculescu, I	0.627	4.439	Q1
2	Reduced graphene oxide/iron oxide nanohybrid flexible electrodes grown by laser-based technique for energy storage applications	<i>CERAMICS INTERNATIONAL</i> , 44 , pp.20409-20416	Queralto, A; del Pino, AP; Logofatu, C; Datcu, A; Amade, R; Bertran-Serra, E; Gyorgy, E	0.437	3.057	Q1
3	Structural and optical properties of optimized amorphous GeTe films for memory applications	<i>JOURNAL OF NON-CRYSTALLINE SOLIDS</i> , 499 , pp.1-7	Galca, AC; Sava, F; Simandan, ID; Bucur, C; Dumitru, V; Porosnicu, C; Mihai, C; Velea, A	0.427	2.488	Q1
4	Networked mesoporous SnO ₂ nanostructures templated by Brij (R) 35 with enhanced H ₂ S selective performance	<i>MICROPOROUS AND MESOPOROUS MATERIALS</i> , 270 , pp.93-101	Stanoiu, A; Simion, CE; Sackmann, A; Baibarac, M; Florea, OG; Osiceanu, P; Teodorescu, VS; Somacescu, S	0.671	3.649	Q1
5	Lincomycin-embedded PANI-based coatings for biomedical applications	<i>APPLIED SURFACE SCIENCE</i> , 455 , pp.653-666	Popescu-Pelin, G; Fufa, O; Popescu, RC; Savu, D; Socol, M; Zgura, I; Holban, AM; Vasile, BS; Grumezescu, V; Socol, G	0.627	4.439	Q1

6	Hydroxyapatite coatings on Mg-Ca alloy prepared by Pulsed Laser Deposition: Properties and corrosion resistance in Simulated Body Fluid	<i>CERAMICS INTERNATIONAL</i> , 44 , pp.16678-16687	Rau, JV; Antoniac, I; Filipescu, M; Cotrut, C; Fosca, M; Nistor, LC; Birjega, R; Dinescu, M	0.437	3.057	Q1
7	Palladium pincer complex incorporation onto the Fe ₃ O ₄ -entrapped cross-linked multilayered polymer as a high loaded nanocatalyst for oxidation'	<i>JOURNAL OF MOLECULAR LIQUIDS</i> , 266 , pp.393-404	Zohreh, N; Hosseini, SH; Tavakolizadeh, M; Busuioc, C; Negrea, R	0.57	4.513	Q1
8	Wide-Range Columnar and Lamellar Photoluminescent Liquid-Crystalline Lanthanide Complexes with Mesogenic 4-Pyridone Derivatives	<i>CHEMISTRY-A EUROPEAN JOURNAL</i> , 24 , pp.13512-13522	Chiriac, LF; Pasuk, I; Secu, M; Micutz, M; Circu, V	1.26	5.160	Q1
9	Polarization Orientation in Lead Zirconate Titanate (001) Thin Films Driven by the Interface with the Substrate	<i>PHYSICAL REVIEW APPLIED</i> , 10 , 34020	Tanase, LC; Abramiuc, LE; Popescu, DG; Trandafir, AM; Apostol, NG; Bucur, IC; Hrib, L; Pintilie, L; Pasuk, I; Trupina, L; Teodorescu, CM	2.124	4.782	Q1
10	Enhanced near-infrared response of a silicon solar cell by using an up-conversion phosphor film of Yb/Er - co-doped CeO ₂	<i>SOLAR ENERGY</i> , 171 , pp.40-46	Grigorescu, M; Secu, M; Trupina, L; Enculescu, M; Besleaga, C; Pintilie, I; Badica, P	0.799	4.374	Q1
11	Magnetism and magnetoresistance of single Ni-Cu alloy nanowires	<i>BEILSTEIN JOURNAL OF NANOTECHNOLOGY</i> , 9 , pp.2345-2355	Costas, A; Florica, C; Matei, E; Toimil-Molares, ME; Stavarache, I; Kuncser, A; Kuncser, V; Enculescu, I	0.745	2.968	Q1
12	Ferroelectric switching dynamics in 0.5Ba(Zr _{0.2} Ti _{0.8})O ₃ -0.5(Ba _{0.7} Ca _{0.3})TiO ₃ thin films	<i>APPLIED PHYSICS LETTERS</i> , 113 , 82903	Silva, JPB; Kamakshi, K; Negrea, RF; Ghica, C; Wang, J; Koster, G; Rijnders, G; Figueiras, F; Pereira, M; Gomes, MJM	0.927	3.495	Q1
13	Orbital Ordering of the Mobile and Localized Electrons at Oxygen-Deficient LaAlO ₃ /SrTiO ₃ Interfaces	<i>ACS NANO</i> , 12 , pp.7927-7935	Chikina, A; Lechermann, F; Husanu, MA; Caputo, M; Cancellieri, C; Wang, XQ; Schmitt, T; Radovic, M; Strocov, VN	4.045	13.709	Q1
14	Highly Efficient, Easily Recoverable, and Recyclable Re-SiO ₂ -Fe ₃ O ₄ Catalyst for the Fragmentation of Lignin	<i>ACS SUSTAINABLE CHEMISTRY & ENGINEERING</i> , 6 , pp.9606-9618	Tudorache, M; Opris, C; Cojocaru, B; Apostol, NG; Tirsoaga, A; Coman, SM; Parvulescu, VI; Duraki, B; Krumeich, F; van Bokhoven, JA	1.142	6.140	Q1
15	Versatile Actuators Based on Polypyrrole-Coated	<i>ACS SUSTAINABLE CHEMISTRY &</i>	Beregoi, M; Preda, N; Evangelidis, A;	1.142	6.140	Q1

	Metalized Eggshell Membranes	ENGINEERING ,6, pp.10173-10181	Costas, A; Enculescu, I			
16	Magneto-optical properties of Ce3+ and Tb3+-doped silico-phosphate sol-gel thin films	APPLIED SURFACE SCIENCE, 448 , pp.474-480	Stefan, CR; Elisa, M; Vasiliu, IC; Sava, BA; Boroica, L; Sofronie, M; Tolea, F; Enculescu, M; Kuncser, V; Beldiceanu, A; Volceanov, A; Eftimie, M	0.627	4.439	Q1
17	Thermal stability of phase change GaSb\GeTe, SnSe\GeTe and GaSb\SnSe double stacked films revealed by X-ray reflectometry and X-ray diffraction	JOURNAL OF NON-CRYSTALLINE SOLIDS, 492 , pp.11-17	Velea, A; Sava, F; Socol, G; Vlaicu, AM; Mihai, C; Lorinczi, A; Simandan, ID	0.427	2.488	Q1
18	k-space imaging of anisotropic 2D electron gas in GaN/GaAlN high-electron-mobility transistor heterostructures	NATURE COMMUNICATIONS, 9 , 2653	Lev, LL; Maiboroda, IO; Husanu, MA; Grichuk, ES; Chumakov, NK; Ezubchenko, IS; Chernykh, IA; Wang, X; Tobler, B; Schmitt, T; Zanaevskin, ML; Valeyev, VG; Strocov, VN	5.685	12.353	Q1
19	Piezoelectric ferromagnetic BNT-BT0.08/CoFe2O4 coaxial core-shell composite nanotubes for nanoelectronic devices	JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS, 752 , pp.381-388	Cernea, M; Vasile, BS; Surdu, VA; Trusca, R; Sima, M; Craciun, F; Galassi, C	0.574	3.779	Q1
20	White-Light Emission of Dye-Doped Polymer Submicronic Fibers Produced by Electrospinning	POLYMERS, 10 , 737	Enculescu, M; Evanghelidis, A; Enculescu, I	0.7	2.935	Q1
21	Different-Length Hydrazone Activated Polymers for Plasmid DNA Condensation and Cellular Transfection	BIOMACROMOLECULES, 19 , pp.2638-2649	Priegue, JM; Lostale-Seijo, I; Crisan, D; Granja, JR; Fernandez-Trillo, F; Montenegro, J	1.279	5.738	Q1
22	Inhibitory effect of three phenacyl derivatives on the oxidation of sphalerite (ZnS) in air-equilibrated acidic solution	CORROSION SCIENCE, 138 , pp.154-162	Chirita, P; Duinea, MI; Sandu, AM; Birsu, LM; Sarbu, LG; Baibarac, M; Sava, F; Popescu, M; Matei, E	0.89	4.862	Q1
23	Localization Properties of Zig-Zag Edge States in Disordered Phosphorene	PHYSICA STATUS SOLIDI-RAPID RESEARCH LETTERS, 12 , 1800051	Nita, M; Ostahie, B; Tolea, M; Aldea, A	0.755	3.721	Q1
24	Epitaxial growth of single-orientation high-quality MoS2 monolayers	2D MATERIALS, 5 , 35012	Bana, H; Travaglia, E; Bignardi, L; Lacovig, P; Sanders, CE; Dendzik, M; Michiardi, M; Bianchi, M; Lizzit, D; Presel, F; De Angelis, D; Apostol, N; Das, PK; Fujii, J; Vobornik, I; Larciprete, R;	2.646	7.042	Q1

			Baraldi, A; Hofmann, P; Lizzit, S			
25	H2S selective sensitivity of Cu doped BaSrTiO3 under operando conditions and the associated sensing mechanism	<i>SENSORS AND ACTUATORS B-CHEMICAL</i> , 264 , pp.327-336	Stanoiu, A; Piticescu, RM; Simion, CE; Rusti-Ciobota, CF; Florea, OG; Teodorescu, VS; Osiceanu, P; Sobetkii, A; Badilita, V	0.787	5.667	Q1
26	The improvement of SiO2 nanotubes electrochemical behavior by hydrogen atmosphere thermal treatment	<i>APPLIED SURFACE SCIENCE</i> , 444 , pp.216-223	Spataru, N; Anastasescu, C; Radu, MM; Balint, I; Negrila, C; Spataru, T; Fujishima, A	0.627	4.439	Q1
27	Polyaniline photoluminescence quenching induced by single-walled carbon nanotubes enriched in metallic and semiconducting tubes	<i>SCIENTIFIC REPORTS</i> , 8 , 9518	Baibarac, M; Matea, A; Daescu, M; Mercioniu, I; Quillard, S; Mevellec, JY; Lefrant, S	1.356	4.122	Q1
28	Compressive properties of pristine and SiC-Te-added MgB2 powders, green compacts and spark-plasma-sintered bulks	<i>CERAMICS INTERNATIONAL</i> , 44 , pp.10181-10191	Badica, P; Batalu, D; Burdusel, M; Grigorescu, MA; Aldica, GV; Enculescu, M; Gabor, RA; Wang, ZY; Huang, RX; Li, PF	0.437	3.057	Q1
29	Synthesis and characterization of CoFe2O4/BNT-BT0.08 core shell nanotubes by a template based sol-gel method	<i>CERAMICS INTERNATIONAL</i> , 44 , pp.10813-10819	Cerneza, M; Vasile, BS; Surdu, VA; Trusca, R; Craciun, F; Galassi, C	0.437	3.057	Q1
30	On the properties of organic heterostructures prepared with nano-patterned metallic electrode	<i>APPLIED SURFACE SCIENCE</i> , 443 , pp.592-602	Breazu, C; Socol, M; Preda, N; Matei, E; Rasoga, O; Girtan, M; Mallet, R; Stanculescu, F; Stanculescu, A	0.627	4.439	Q1
31	Combined use of Mossbauer spectroscopy, XPS, HRTEM, dielectric and anelastic spectroscopy for estimating incipient phase separation in lead titanate-based multiferroics	<i>PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS</i> , 20 , pp.14652-14663	Craciun, F; Cordero, F; Vasile, BS; Fruth, V; Zaharescu, M; Atkinson, I; Trusca, R; Diamandescu, L; Tanase, LC; Galizia, P; Cernea, M; Galassi, C	1.078	3.906	Q1
32	Engineering active sites on reduced graphene oxide by hydrogen plasma irradiation: mimicking bifunctional metal/supported catalysts in hydrogenation reactions	<i>GREEN CHEMISTRY</i> , 20 , pp.2611-2623	Primo, A; Franconetti, A; Magureanu, M; Mandache, NB; Bucur, C; Rizescu, C; Cojocaru, B; Parvulescu, VI; Garcia, H	1.58	8.586	Q1
33	Thermodynamic, structural and magnetic studies of phase transformations in MnAl nanocomposite alloys	<i>MATERIALS CHARACTERIZATION</i> , 140 , pp.1-8	Crisan, AD; Vasiliu, F; Nicula, R; Bartha, C; Mercioniu, I; Crisan, O	0.692	2.892	Q1

34	Ferroelectric photovoltaic characteristics of pulsed laser deposited 0.5Ba (Zr _{0.2} Ti _{0.8})O-3-0.5(Ba _{0.7} Ca _{0.3})TiO ₃ /ZnO heterostructures	<i>SOLAR ENERGY</i> , 167 , pp.18-23	Silva, JPB; Sekhar, KC; Cortes-Juan, F; Negrea, RF; Kuncser, AC; Connolly, JP; Ghica, C; Moreira, JA	0.799	4.374	Q1
35	Gallium incorporation into phosphate based glasses: Bulk and thin film properties	<i>JOURNAL OF THE MECHANICAL BEHAVIOR OF BIOMEDICAL MATERIALS</i> , 82 , pp.371-382	Stuart, BW; Grant, CA; Stan, GE; Popa, AC; Titman, JJ; Grant, DM	0.791	3.239	Q1
36	Branch-like NiO/ZnO heterostructures for VOC sensing	<i>SENSORS AND ACTUATORS B-CHEMICAL</i> , 262 , pp.477-485	Kaur, N; Zappa, D; Ferroni, M; Poli, N; Campanini, M; Negrea, R; Comini, E	0.787	5.667	Q1
37	New bio-active, antimicrobial and adherent coatings of nanostructured carbon double-reinforced with silver and silicon by Matrix-Assisted Pulsed Laser Evaporation for medical applications	<i>APPLIED SURFACE SCIENCE</i> , 441 , pp.871-883	Duta, L; Ristoscu, C; Stan, GE; Husanu, MA; Besleaga, C; Chifiriuc, MC; Lazar, V; Bleotu, C; Miculescu, F; Mihailescu, N; Axente, E; Badiceanu, M; Bociaga, D; Mihailescu, IN	0.627	4.439	Q1
38	Large positive linear magnetoresistance in the two-dimensional t(2g) electron gas at the EuO/SrTiO ₃ interface	<i>SCIENTIFIC REPORTS</i> , 8 , 7721	Kormondy, KJ; Gao, LY; Li, X; Lu, SR; Posadas, AB; Shen, SD; Tsoi, M; McCartney, MR; Smith, DJ; Zhou, JS; Lev, LL; Husanu, MA; Strocov, VN; Demkov, AA	1.356	4.122	Q1
39	Photocatalytic activity of wool fabrics deposited at low temperature with ZnO or TiO ₂ nanoparticles: Methylene blue degradation as a test reaction	<i>CATALYSIS TODAY</i> , 306 , pp.251-259	Frunza, L; Diamandescu, L; Zgura, I; Frunza, S; Ganea, CP; Negriila, CC; Enculescu, M; Birzu, M	0.868	4.667	Q1
40	Influence of Mn content on the catalytic properties of Cu(Mn)-Zn-Mg-Al mixed oxides derived from LDH precursors in the total oxidation of methane	<i>CATALYSIS TODAY</i> , 306 , pp.276-286	Raculet, M; Layrac, G; Papa, F; Negriila, C; Tichit, D; Marcu, IC	0.868	4.667	Q1
41	Voltammetric and atomic force microscopy characterization of chymotrypsin, trypsin and caspase activities of proteasome	<i>CATALYSIS TODAY</i> , 306 , pp.287-293	de Jesus, CSH; Paquim, AMC; Diculescu, VC	0.868	4.667	Q1
42	Structure of high-resolution K beta(1,3) x-ray emission spectra for the elements from Ca to Ge	<i>PHYSICAL REVIEW A</i> , 97 , 52505	Ito, Y; Tochio, T; Yamashita, M; Fukushima, S; Vlaicu, AM; Syrocki, L; Slabkowska, K; Weder, E; Polasik, M; Sawicka, K; Indelicato, P; Marques, JP; Sampaio, JM;	0.899	2.909	Q1

			Guerra, M; Santos, JP; Parente, F			
43	Hysteretic Characteristics of Pulsed Laser Deposited 0.5Ba(Zr0.2Ti0.8)O-3-0.5(Ba0.7Ca0.3)TiO3/ZnO Bilayers	<i>ACS APPLIED MATERIALS & INTERFACES</i> , 10 , pp.15240-15249	Silva, JPB; Wang, J; Koster, G; Rijnders, G; Negrea, RF; Ghica, C; Sekhar, KC; Moreira, JA; Gomes, MJM	1.634	8.097	Q1
44	Antimicrobial Activity of New Materials Based on Lavender and Basil Essential Oils and Hydroxyapatite	<i>NANOMATERIALS</i> , 8 , 291	Predoi, D; Iconaru, SL; Buton, N; Badea, ML; Marutescu, L	0.696	3.504	Q1
45	Photoelectrochemical response of carbon dots (CDs) derived from chitosan and their use in electrochemical imaging	<i>MATERIALS HORIZONS</i> , 5 , pp.423-428	Zhang, DW; Papaioannou, N; David, NM; Luo, H; Gao, H; Tanase, LC; Degousee, T; Samori, P; Sapelkin, A; Fenwick, O; Titirici, MM; Krause, S	3.148	13.183	Q1
46	Physical-chemical characterization and biological assessment of simple and lithium-doped biological-derived hydroxyapatite thin films for a new generation of metallic implants	<i>APPLIED SURFACE SCIENCE</i> , 439 , pp.724-735	Popescu, AC; Florian, PE; Stan, GE; Popescu-Pelin, G; Zgura, I; Enculescu, M; Oktar, FN; Trusca, R; Sima, LE; Roseanu, A; Duta, L	0.627	4.439	Q1
47	Influence of cobalt ferrite content on the structure and magnetic properties of (CoFe2O4)(x) (SiO2-PVA)(100-X) nanocomposites	<i>CERAMICS INTERNATIONAL</i> , 44 , pp.7891-7901	Dippong, T; Cadar, O; Levei, EA; Deac, IG; Diamandescu, L; Barbu-Tudoran, L	0.437	3.057	Q1
48	Influence of the modulated two-step synthesis of biogenic hydroxyapatite on biomimetic products' surface	<i>APPLIED SURFACE SCIENCE</i> , 438 , pp.147-157	Miculescu, F; Mocanu, AC; Stan, GE; Miculescu, M; Maidaniuc, A; Cimpean, A; Mitran, V; Voicu, SI; Machedon-Pisu, T; Ciocan, LT	0.627	4.439	Q1
49	Graphene growth by molecular beam epitaxy: an interplay between desorption, diffusion and intercalation of elemental C species on islands	<i>NANOSCALE</i> , 10 , pp.7396-7406	Presel, F; Tetlow, H; Bignardi, L; Lacovig, P; Tache, CA; Lizzit, S; Kantorovich, L; Baraldi, A	1.704	7.233	Q1
50	Ambiguous Role of Growth-Induced Defects on the Semiconductor-to-Metal Characteristics in Epitaxial VO2/TiO2 Thin Films	<i>ACS APPLIED MATERIALS & INTERFACES</i> , 10 , pp.14132-14144	Mihailescu, CN; Symeou, E; Svoukis, E; Negrea, RF; Ghica, C; Teodorescu, V; Tanase, LC; Negri, C; Giapintzakis, J	1.634	8.097	Q1
51	The adsorption of silicon on an iridium surface ruling out silicene growth	<i>NANOSCALE</i> , 10 , pp.7085-7094	Satta, M; Lacovig, P; Apostol, N; Dalmiglio, M; Orlando, F; Bignardi, L; Bana, H; Travaglia, E; Baraldi,	1.704	7.233	Q1

			A; Lizzit, S; Larciprete, R			
52	Strong composition dependence of resistive switching in Ba _{1-x} Sr _x TiO ₃ thin films on semiconducting substrates and its thermodynamic analysis	<i>ACTA MATERIALIA</i> , 148 , pp.419-431	Mohammadmoradi, O; Sen, C; Boni, AG; Pintilie, L; Misirliloglu, IB	1.673	6.036	Q1
53	Bismuth and lead oxides codoped boron phosphate glasses for Faraday rotators	<i>CERAMICS INTERNATIONAL</i> , 44 , pp.6016-6025	Sava, BA; Boroica, L; Elisa, M; Shikimaka, O; Grabco, D; Popa, M; Barbos, Z; Iordanescu, R; Niculescu, AM; Kuncser, V; Galca, AC; Eftimie, M; Monteiro, RCC	0.437	3.057	Q1
54	H ₂ S sensing mechanism of SnO ₂ -CuWO ₄ operated under pulsed temperature modulation	<i>SENSORS AND ACTUATORS B-CHEMICAL</i> , 259 , pp.258-268	Simion, CE; Somacescu, S; Teodorescu, VS; Osiceanu, P; Stanoiu, A	0.787	5.667	Q1
55	Synthesis of graphene-based photocatalysts for water splitting by laser-induced doping with ionic liquids	<i>CARBON</i> , 130 , pp.48-58	del Pino, AP; Gonzalez-Campo, A; Giraldo, S; Peral, J; Gyorgy, E; Logofatu, C; deMello, AJ; Puigmarti-Luis, J	1.39	7.082	Q1
56	Yellow laser potential of cubic Ca-3(Nb,Ga)(5)O-12:Dy ³⁺ and Ca-3(Li,Nb,Ga)(5)O-12:Dy ³⁺ single crystals	<i>JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS</i> , 739 , pp.806-816	Gheorghe, C; Hau, S; Gheorghe, L; Voicu, F; Greculeasa, M; Enculescu, M; Belikov, KN; Bryleva, EY; Gaiduk, OV	0.574	3.779	Q1
57	Dense Ge nanocrystals embedded in TiO ₂ with exponentially increased photoconduction by field effect	<i>SCIENTIFIC REPORTS</i> , 8 , 4898	Lepadatu, AM; Slav, A; Palade, C; Dascalescu, I; Enculescu, M; Iftimie, S; Lazanu, S; Teodorescu, VS; Ciurea, ML; Stoica, T	1.356	4.122	Q1
58	Cracks and nanodroplets produced on tungsten surface samples by dense plasma jets	<i>APPLIED SURFACE SCIENCE</i> , 434 , pp.1122-1128	Ticos, CM; Galatanu, M; Galatanu, A; Luculescu, C; Scurtu, A; Udrea, N; Ticos, D; Dumitru, M	0.627	4.439	Q1
59	Influence of Gd and Pr doping on the properties of ceria: texture, structure, redox behaviour and reactivity in CH ₄ /H ₂ O reactions in the presence of H ₂ S	<i>CATALYSIS SCIENCE & TECHNOLOGY</i> , 8 , pp.1333-1348	Florea, M; Postole, G; Matei-Rutkovska, F; Urda, A; Neatu, F; Massin, L; Gelin, P	1.105	5.365	Q1
60	Effect of green body annealing on laser performance of YAG:Nd ³⁺ ceramics	<i>CERAMICS INTERNATIONAL</i> , 44 , pp.4487-4490	Yavetskiy, RP; Parkhomenko, SV; Vorona, IO; Tolmachev, AV; Kosyanov, DY; Kuryavyi, VG; Mayorov, VY; Gheorghe, L;	0.437	3.057	Q1

			Croitoru, G; Enculescu, M			
61	Triggering surface ferroelectric order in Pb(Zr, Ti)O ₃ (001) by deposition of platinum	<i>APPLIED SURFACE SCIENCE</i> , 432 , pp.27-33	Bucur, IC; Tanase, LC; Abramiuc, LE; Lungu, GA; Chirila, C; Trupina, L; Apostol, NG; Costescu, RM; Negrea, RF; Pintilie, L; Teodorescu, CM	0.627	4.439	Q1
62	Spherical cobalt/cobalt oxide - Carbon composite anodes for enhanced lithium-ion storage	<i>ELECTROCHIMICA ACTA</i> , 264 , pp.191-202	Patrinoiu, G; Etacheri, V; Somacescu, S; Teodorescu, VS; Birjega, R; Culita, DC; Hong, CN; Calderon-Moreno, JM; Pol, VG; Carp, O	0.832	5.116	Q1
63	Thermophysical properties of Cu-ZrO ₂ composites as potential thermal barrier materials for a DEMO W-monoblock divertor	<i>FUSION ENGINEERING AND DESIGN</i> , 127 , pp.179-184	Galatanu, M; Enculescu, M; Galatanu, A	0.281	1.437	Q1
64	CdS/ZnS-doped silico-phosphate films prepared by sol-gel synthesis	<i>JOURNAL OF NON-CRYSTALLINE SOLIDS</i> , 481 , pp.435-440	Rusu, MI; Stefan, CR; Elisa, M; Feraru, ID; Vasiliu, IC; Bartha, C; Trusca, RD; Vasile, E; Peretz, S	0.427	2.488	Q1
65	Impact of thickness variation on structural, dielectric and piezoelectric properties of (Ba, Ca) (Ti, Zr)O ₃ epitaxial thin films	<i>SCIENTIFIC REPORTS</i> , 8 , 2056	Ion, V; Craciun, F; Scarisoreanu, ND; Moldovan, A; Andrei, A; Birjega, R; Ghica, C; Di Pietrantonio, F; Cannata, D; Benetti, M; Dinescu, M	1.356	4.122	Q1
66	Enhanced UV- and visible-light driven photocatalytic performances and recycling properties of graphene oxide/ZnO hybrid layers	<i>CERAMICS INTERNATIONAL</i> , 44 , pp.1826-1835	Gyorgy, E; Logofatu, C; del Pino, AP; Datcu, A; Pascu, O; Ivan, R	0.437	3.057	Q1
67	Coordination environment of Zn in foraminifera Elphidium aculeatum and Quinqueloculina seminula shells from a polluted site	<i>CHEMICAL GEOLOGY</i> , 477 , pp.100-111	de Giudici, G; Meneghini, C; Medas, D; Buosi, C; Zuddas, P; Iadecola, A; Mathon, O; Cherchi, A; Kuncser, AC	1.56	3.570	Q1
68	Dielectric properties of a bisimidazolium salt with dodecyl sulfate anion doped with carbon nanotubes	<i>BEILSTEIN JOURNAL OF NANOTECHNOLOGY</i> , 9 , pp.164-174	Maximean, DM; Circu, V; Ganea, CP	0.745	2.968	Q1
69	Material parameters from frequency dispersion simulation of floating gate memory with Ge nanocrystals in HfO ₂	<i>APPLIED SURFACE SCIENCE</i> , 428 , pp.698-702	Palade, C; Lepadatu, AM; Slav, A; Lazanu, S; Teodorescu, VS; Stoica, T; Ciurea, ML	0.627	4.439	Q1

70	Influence of In-Gap States on the Formation of Two-Dimensional Election Gas at ABO(3)/SrTiO3 Interfaces	SCIENTIFIC REPORTS, 8, 195	Li, CJ; Xue, HX; Qu, GL; Shen, SC; Hong, YP; Wang, XX; Liu, MR; Jiang, WM; Badica, P; He, L; Dou, RF; Xiong, CM; Lu, WM; Nie, JC	1.356	4.122	Q1
71	Surface States- and Field- Effects at GaAs(100) Electrodes in Sodium Dodecyl Sulfate Acid Solution	JOURNAL OF THE ELECTROCHEMICAL SOCIETY, 165, pp.H3008-H3017	Enache, M; Negrila, C; Anastasescu, M; Dobrescu, G; Lazarescu, MF; Lazarescu, V	0.726	3.662	Q1
72	Effect of Li doping on the electric and pyroelectric properties of ZnO thin films	APPLIED SURFACE SCIENCE, 427, pp.29-37	Trinca, LM; Galca, AC; Boni, AG; Botea, M; Pintilie, L	0.627	4.439	Q1

Pe langa publicatii in jurnale cu factor de impact, Nucleul produce si numeroase rezultate cu potential aplicativ. Acest fapt este reflectat in numarul ridicat de cereri de brevet, brevete acordate si modele de utilitate inregistrat in 2018:

#	Titlu Brevet	Autori	Nr. Inregistrare cerere sau nr decizie acordare	Data inregistrare cerere sau data Decizie Acordare
1	OCHELARI CU METASUPRAFEȚE ACTIVE PENTRU ÎMBUNĂȚĂȚIREA PERCEPȚIEI IMAGINILOR ÎN CONDIȚII DIFICILE DE VIZIBILITATE	COTÎRLAN-SIMIONUC COSTEL	A00815	10/18/2018
2	OBȚINERE ȘI MATERIAL CERAMIC PENTRU CĂRĂMIZI, REPLICĂ A CELOR ROMANE	PETRE BĂDICĂ, DAN BATALU, MIHAI-ALEXANDRU GRIGOROȘCUȚĂ, GHEORGHE VIRGIL ALDICA, IONUȚ SĂVULESCU, MIRCEA RADU	A00740	9/28/2018
3	PROCEDEU DE PREPARARE A LUMINOFORULUI NANOCRISTALIN CeF ₃ :Tb ³⁺	MIHAIL SECU, CORINA SECU	A00622	8/29/2018
4	STRAT MEZOPOROS PENTRU CELULE SOLARE PE BAZĂ DE PEROVSKIȚI ȘI METODA DE OBȚINERE	IOANA PINTILIE, ANDREI-GABRIEL TOMULESCU, LUCIA NICOLETA LEONAT, VIORICA STANCU, CRISTINA BEȘLEAGĂ STAN, VASILICA TOMA, VIOREL-GEORGEL DUMITRU, LUCIAN PINTILIE	A00364	5/23/2018
5	STRUCTURĂ DE MEMORIE OPTOELECTRICĂ CU POARTĂ FLOTANTĂ DIN NANOCRISTALE DE GERMANIU ȘI PROCEDEU DE REALIZARE A ACESTEIA	STOICA TOMA, PALADE CĂTĂLIN, SLAV ADRIAN, LEPĂDATU ANA-MARIA	A00413	6/12/2018
6	STRUCTURĂ DE DOZIMETRU PE BAZĂ DE CAPACITOR MOS CU POARTĂ FLOTANTĂ DIN NANOCRISTALE DE GERMANIU ȘI	LAZANU SORINA, PALADE CĂTĂLIN, LEPĂDATU ANA-MARIA, STĂVĂRACHE IONEL, CIUREA MAGDALENA LIDIA	A00277	4/19/2018

	PROCEDEU DE REALIZARE A ACESTEIA			
7	MEMORIE CAPACITIVĂ ȘI METODĂ DE OPERARE	BONI GEORGIA ANDRA, CHIRILĂ CRISTINA, HRIB LUMINIȚA, VIOREL DUMITRU, PINTILIE IOANA, PINTILIE LUCIAN	A00363	5/23/2018
8	CIRCUITE LOGICE CU MEMORIE CAPACITIVĂ	BONI GEORGIA ANDRA, CHIRILĂ CRISTINA, HRIB LUMINIȚA, VIOREL DUMITRU, PINTILIE IOANA, PINTILIE LUCIAN	A00560	7/31/2018
9	PROCEDEU DE OBTINERE A UNUI FOTODETECTOR PE BAZĂ DE MATRIȚI DE NANOFIRE MIEZ-COAJĂ DE TIP OXID DE CUPRU ȘI OXID DE ZINC PREPARATE PE ELECTROZI METALICI INTERDIGITAȚI	COSTAȘ LILIANA-ANDREEA, FLORICA CAMELIA-FLORINA, PREDĂ NICOLETA-ROXANA, EVANGHELIDIS ALEXANDRU IONUȚ, BEȘLEAGĂ STAN CRISTINA, BEREGOI MIHAELA, ENCULESCU MARIA-MONICA, MATEI ELENA, DICULESCU VICTOR-CONSTANTIN, ENACHE TEODOR ADRIAN, IGNAT-BÂRSAN MĂDĂLINA MARIA, ONEA MELANIA LOREDANA, ALDEA ANCA, APOSTOL MARIANA MIHAELA, BUNEA MIHAELA-CRISTINA, CRIȘAN DANIEL NICOLAE, CONSTANTINESCU MIHAI OCTAVIAN, ENCULESCU IONUȚ-MARIUS	A00439	6/19/2018
10	MATERIAL SENSIBIL LA GAZUL METAN LA TEMPERATURA CAMEREI	LŐRINCZI ADAM, FĂGĂDAR-COSMA EUGENIA, SOCOL GABRIEL, MIHĂILESCU ANDREEA, MATEI ELENA, ȘTEFAN MARIANA, LOGOFĂTU CONSTANTIN	A00621	8/29/2018
11	PROCEDEU DE OXIDARE SELECTIVĂ A p-PECIMENULUI DIN SURSE REGENERABILE ÎN PREZENȚĂ DE CATALIZATORI ETEROGENI OXIZI MICȘTI PE BAZĂ DE COBALT	NEAȚU FLORENTINA, NEAȚU ȘTEFAN, FLOREA MIHAELA	A00242	4/4/2018
12	INSTALAȚIE PENTRU OBTINEREA PRIN ELECTROFILARE A SUBSTRATURILOR FIBRILARE DIN BIOPOLIMERI	CIOCA MIHAI, DOBRESCU GABRIEL, IGHIGEANU ADELINA MARIA, EVANGHELIDIS ALEXANDRU, MATEI ELENA ENCULESCU IONUȚ	U00037 (model de utilitate)	7/31/2018
14	PROCEDEU DE OBTINERE A PULBERII DE HIDROXIAPATITĂ ÎN MATRIȚE DE SILICIU, UTILIZATĂ PENTRU APLICAȚII DE MEDIU	PREDOI DANIELA, CIOBANU STELUȚA CARMEN, GHIȚĂ RODICA, POPA CRISTINA-LIANA, ICONARU SIMONA-LILIANA	131326 (acordat)	9/28/2018
15	STRUCTURA DE CAPACITOR PENTRU MEMORIE NEVOLATILĂ PE BAZA DE NANOCRISTALE DE GERMANIU IMERSATE ÎN DIOXID DE SILICIU	CIUREA LIDIA MAGDALENA, STAVARACHE IONEL, TEODORESCU VALENTIN SERBAN	131074 (acordat)	4/27/2018

16	PROCEDEU DE OBTINERE DE MICRO SI NANOFIBRE POLIMERICE PRIN ELECTROSPINNING FOLOSIND MATERIALE TEXTILE PENTRU OBTINEREA DE JETURI MULTIPLE	EVANGHELIS ALEXANDRU IONUT, BUSUIOC CRISTINA, MATEI ELENA, ENCULESCU MARIA-MONICA, PREDĂ NICOLETA-ROXANA, FLORICA CAMELIA-FLORINA, COSTAS LILIANA-ANDREEA, OANCEA MIHAELA, ENCULESCU IONUT-MARIUS	131565 (acordat)	4/27/2018
17	MATRICE CAPACITIVĂ PENTRU MEMORIE NEVOLATILĂ, BAZATĂ PE NANOCRISTALE DE GERMANIU IMERSATE ÎN DIOXID DE HAFNIU ȘI PROCEDEU DE REALIZARE A ACESTEIA	SLAV, A; PALADE, C; LEPADATU, AM; LAZANU, S; CIUREA, ML; VASILACHE, D; DRAGOMAN, M;	131968 (acordat)	5/30/2018
18	METODĂ ȘI DISPOZITIV DE MĂSURARE A PROPRIETĂȚILOR OPTICE ALE STRATURILOR SUBȚIRI DEPUSE PE SUPRAFEȚE SAU INTERFEȚE CU REFLEXIE TOTALĂ INTERNĂ	COTÎRLAN-SIMIONUC COSTEL, LĂZĂRESCU MIHAIL FLORIN	128062 (acordat)	5/30/2018
19	PROCEDEU DE OBTINERE A UNOR NANOSTRUCTURI UNIDIMENSIONALE DE OXID DE ZINC PRIN OXIDARE TERMICĂ ÎN AER A UNOR FOLII DE ZINC	FLORICA CAMELIA-FLORINA, PREDĂ NICOLETA-ROXANA, COSTAȘ LILIANA-ANDREEA, EVANGHELIDIS ALEXANDRU IONUȚ, OANCEA MIHAELA, ENCULESCU MARIA-MONICA, MATEI ELENA, ENCULESCU MARIUS-IONUȚ	131555 (acordat)	5/30/2018

Premii obtinute in 2017

Premiul Radu Grigorovici pentru anul 2015 (decernate in 2017):

Grupul de lucrări: *"Proprietăți structurale în straturi epitaxiale oxidice, nanostructuri și nanocompozite"*

autori: **Raluca NEGREA, Cristina CHIRILĂ și Georgia BONI**

și

Grupul de lucrări: *"Spectroscopie de fotoelectroni și calcule ab-initio aplicate la studiul suprafețelor și interfețelor"*

autori: **Marius HUȘANU și Dana POPESCU**

Premii obtinute la EUROINVENT 2018 (mai, Iasi)

GOLD MEDAL AND CERTIFICATE OF ATTENDANCE	FERROELECTRIC MEMOMRY STRUCTURE WITH MULTIPLE MEMORY STATES AND FABRICATION METHOD	GEORGIA ANDRA BONI, CRISTINA CHIILĂ, LUMINIȚA HRIB, PINTILIE IOANA, PINTILIE LUCIAN
GOLD MEDAL AND CERTIFICATE OF ATTENDANCE	ULTRA-LOW POWER RESPIRATION RATE SENSOR	BEȘLEAGĂ STAN CRISTINA, DUMITRU VIOREL-GEORGEL
GOLD MEDAL AND CERTIFICATE OF ATTENDANCE	MAGNETIC MATERIAL BASED ON NANOPARTICLES OF IRON NITRIDE WITH	COMĂNESCU CEZAR CĂTĂLIN, PALADE PETRU, KUNCSEI ANDREI RISTIAN,

	ORDERED MARTENSITE STRUCTURE AND ITS MANUFACTURING METHOD	PLĂPCIANU CARMEN GABRIELA
SILVER MEDAL AND CERTIFICATE OF ATTENDANCE	PROCESS FOR OBTAINING A TITANIUM DIOXIDE DOPED COMPOSITE WITH REDUCED IRON/NITROGEN/REDUCED GRAPHITE OXIDE, WITH EXTENDED PHOTOCATALYTIC ACTIVITY IN THE VISIBLE FIELD	FEDER MARCEL, DIAMANDESCU LUCIAN CONSTANTIN, CERNEA MARIN, STERIAN GHEORGHE, DUMITRESCU IULIANA
DIPLOMA OF EXCELLENCE AND CERTIFICATE OF ATTENDANCE	OBTAINING AN PHOTOACTIVE STRUCTURE ON n-GaSb	GHIȚĂ RODICA, NEGRILĂ, CONSTANTIN-CĂTĂLIN, LOGOFĂTU CONSTANTIN, MIHAI MARIA-DIANA, PREDOI DANIELA, STOICU MARIUS
DIPLOMA OF EXCELLENCE AND CERTIFICATE OF ATTENDANCE	PROCESSING METHOD AND SUPERCONDUCTING TAPE/WIRE IN A LIGHT METAL SHEATH WITH MgB ₂ CORE	MIHAI ALEXANDRU GRIGOROȘCUȚĂ, MIHAIL BURDUȘEL, GHEORGHE VIRGIL ALDICA, PETRE BĂDICĂ
DIPLOMA OF EXCELLENCE AND CERTIFICATE OF ATTENDANCE	PROCESS FOR PREPARING THE BaCl ₂ :Eu ²⁺ LUMINOPHORE	MIHAIL SECU, CORINA- ELISABETA SECU

7. DECLARAȚIILE SOLICITANTULUI

Sub sancțiunea descalificării propunerii de proiect, sau după caz, a nulității contractului de finanțare, precum și a consecințelor legale decurgând din furnizarea de date și informații false sau incorecte, declar pe propria răspundere :

1. Proiectul propus nu a fost, nu este finanțat în cadrul altor programe.	2. Datele și informațiile privind propunerea de proiect sunt reale, exacte, corecte.
---	--

Reprezentant legal	
DIRECTOR GENERAL	Responsabil proiect
<i>Nume Prenume</i>	<i>Nume Prenume</i>
<i>Semnătură</i>	<i>Semnătură</i>
	

**Anexa 1.4. la Structura cadru Program Nucleu
CURRICULUM VITAE**

Curriculum vitae Europass	Inserați fotografia. (rubrică facultativă, vezi instrucțiunile) 
Informații personale	
Nume / Prenume	Pintilie Lucian
Adresă(e)	Acasa: Alunis 10, Magurele, Ilfov, 077125 Romania Serviciu: Atomistilor 405A, Magurele, Ilfov, 077125, Romania
Telefon(oane)	0214575827 (acasa); 0213690170 (serviciu); 0723185411 (mobil)
Fax(uri)	0213690177 (serviciu)
E-mail(uri)	pintilie@infim.ro ; pintiluc@yahoo.com
Naționalitate(-tăți)	Roamana
Data nașterii	30.09.1959
Sex	masculin
Locul de muncă vizat / Domeniul ocupațional	Colegiul Consultativ pentru Cercetare-Dezvoltare si Inovare
	Experiența profesională
Perioada	Aprilie 2016-prezent
Funcția sau postul ocupat	Director Stiintific
Activități și responsabilități principale	Activitate de coordonare a departamentelor si laboratoarelor de cercetare din institut; coordonarea concursurilor de angajare pe posturi de cercetare; elaborarea strategiei INCDFM; reprezentarea INCDFM in relatia cu parteneri nationali si internationali, precum si in relatia cu autoritatile publice
Numele și adresa angajatorului	INCDFM (Institutul National de Cercetare-Dezvoltare pentru Fizica Materialelor), Atomistilor 405A, Magurele, 077125, Romania
Tipul activității sau sectorul de activitate	Cercetare-Dezvoltare-Inovare
Perioada	Ianuarie 2013-Aprilie 2016
Funcția sau postul ocupat	CS1, Sef de laborator
Activități și responsabilități principale	Activitate de cercetare (sinteza de materiale, masuratori, propuneri de proiecte, elaborarea de lucrari, propunerea de aplicatii; management de proiecte; management grup de cercetare)
Numele și adresa angajatorului	INCDFM (Institutul National de Cercetare-Dezvoltare pentru Fizica Materialelor), Atomistilor 405A, Magurele, 077125, Romania
Tipul activității sau sectorul de activitate	Cercetare-Dezvoltare-Inovare
Perioada	Decembrie 2008-Ianuarie 2013
Funcția sau postul ocupat	Director General INCDFM
Activități și responsabilități principale	Managementul institutului

Numele și adresa angajatorului	INCDFM (Institutul National de Cercetare-Dezvoltare pentru Fizica Materialelor), Atomistilor 405A, Magurele, 077125, Romania
Tipul activității sau sectorul de activitate	Management institutie de cercetare
Perioada	1987-2008
Funcția sau postul ocupat	ACS (1987-1990), CS (1990-1995), CS3 (1995-1998), CS2 (1998-2001), CS1 (2001-prezent) Sef de Laborator intre 1997 si 2004
Activități și responsabilități principale	Activitate de cercetare (executie probe, caracterizare, analiza date experimentale, redactare lucrari stiintifice, conducere de granturi si proiecte de cercetare); activitate organizatorica (ca sef de laborator); activitate administrativa
Numele și adresa angajatorului	INCDFM (Institutul National de Cercetare-Dezvoltare pentru Fizica Materialelor), Atomistilor 405A, Magurele, 077125, Romania
Tipul activității sau sectorul de activitate	Cercetare
Perioada	1984-1987
Funcția sau postul ocupat	Inginer fizician stagiar
Activități și responsabilități principale	Achizitii echipamente de cercetare si productie
Numele și adresa angajatorului	Combinatul Chimic Giurgiu
Tipul activității sau sectorul de activitate	Productie chimie
	Educație și formare
Perioada	2001-2007
Calificarea / diploma obținută	Stagii de lucru si burse post-doctorale
Disciplinele principale studiate	Fizica Starii Condensate; Stiinta materialelor; Fizica materialelor feroelectrice si multiferoice
Numele și tipul instituției de învățământ	IKZ Berlin, Germania (2001-2002); Universitatea din Braga, Portugalia (2002-2003); Institutul Max Planck pentru Fizica Microstructurilor din Halle, Germania (2003-2007)
Nivelul în clasificarea națională sau internațională	ISCED 44-Physical sciences
Perioada	1990-1995
Calificarea / diploma obținută	Doctorat
Disciplinele principale studiate	Fizica Starii Condensate
Numele și tipul instituției de învățământ	IFA Bucuresti
Nivelul în clasificarea națională sau internațională	ISCED 8-Doctoral or equivalent level

Perioada	1979-1984										
Calificarea / diploma obținută	Licenta si master										
Disciplinele principale studiate	Fizica/Fizica tehnologica										
Numele și tipul instituției de învățământ	Facultatea de Fizica, Universitatea Bucuresti										
Nivelul în clasificarea națională sau internațională	ISCED 7-Master or equivalent level										
Limba(i) maternă(e)	Romana										
Limba(i) străină(e) cunoscută(e)											
Autoevaluare		Înțelegere				Vorbire				Scriere	
Nivel european (*)		Ascultare		Citire		Participare la conversație		Discurs oral		Exprimare scrisă	
Limba Engleza		C1	Avansat	C1	Avansat	C1	Avansat	C1	Avansat	C1	Avansat
Limba Franceza		A2	Incepator	A2	Incepator	A1	Incepator	A1	Incepator	A1	Incepator
	(*) Nivelul Cadrului European Comun de Referință Pentru Limbi Străine										
Aptitudini și competențe de comunicare; participare in comisii si consilii consultative sau de evaluare	Munca de sef de laborator sau de manager de institut presupune comunicare atat pe orizontala cat si pe verticala. Participat la mai multe cursuri de management si comunicare in cercetare (2003-CIPRE; 2008-INA; 2009-Economix si Carroll School of Management). Abilitati de comunicare si de formare tineri cercetatori. 2008-prezent: membru in Consiliul Stiintific al INCDFM 2008-2013: membru in Consiliul de administratie la INCDFM 1997-2004 si 2008-prezent: membru in Comitetul de Directie al INCDFM 2010-2012: membru al Consiliului National de Atestare a Titlurilor, Diplomelor si Certificatelor Universitare (CNATDCU) 2010-present: membru in Biroul Executiv al Patronatului Roman din Cercetare-Proiectare 2015: numit reprezentant al Romaniei in Programul ERA-NET RUS-PLUS, cu sediul la DLR Bonn, Germania 2010: Referent Office of Basic Energy Sciences, Department of Energy, USA 2011-2013: monitor proiecte FP7 2011-2015: Reeferent, Faculty of Engineering and Natural Sciences, Sabanci University, Istanbul, Turkey 2015: Referent, Euro-talents Program, CEA, France 2015: Referent, Executive Unit for Funding High Education, Research, Development and Innovation (UEFISCDI) 2013-2014: reprezentant al CC-CDI in cadrul exercitiului national de evaluare al INCDF-urilor (desemnat pentru ICCF-Bucuresti, ICECHIM-Bucuresti si INSEMEX-Petrosani) 2016-prezent: membru al Consiliului National de Atestare a Titlurilor, Diplomelor si Certificatelor Universitare (CNATDCU)										

Aptitudini și competențe organizatorice; participare la elaborarea de reglementari și lucrări specifice domeniului CDI	Abilitati de a organiza si conduce grupuri de oameni, dobandite ca director de proiect, sef de laborator, director general de institut. Director sau responsabil al echipelor de cercetare la mai multe proiecte nationale sau internationale (vezi lista proiecte). Participant la elaborarea urmatoarelor strategii: Strategia Nationala CDI 2014-2020, membru in panelul de Materiale Strategia NANOPROSPECT in domeniul nanotehnologiilor si nanomaterialelor-reprezentant al INCDFM in consorțiul de elaborare a strategiei Studiul ESFRO privind evaluarea potentialului romanesc de cercetare in domeniul fizicii si elaborarea unei strategii privind colabrarile internationale-reprezentant al INCDFM in consorțiul de elaborare
Aptitudini și competențe tehnice	Electronica (la nivel de incepator); mecanica, lacatuserie, sudura (auto-didact); utilizarea echipamentelor stiintifice de masura (curent, capacitate, etc.) Utilizator programe comerciale (Office, Origin, Mathcad, etc.)
Alte competențe și aptitudini	Premii si distinctii: 2000-Diploma de excelenta in cercetare acordata de ANSTI 2009-Premiul „Dragomir Hurmuzescu” al Academiei Romane 2010-Diploma de manager al anului acordata de ANCS Membru in colective redactionale, referent 2009, 2012, 2014, 2015: Guest Editor; Thin Solid Films, Elsevier, the Netherlands Referent la: Advanced Materials, Physical Review Letters, Physical Review B, ACS Advanced Materials and Interfaces, Acta Materialia, Applied Physics Letters, Thin Solid Films, Physica Status Solidi, Microelectronic Engineering, Chemistry of Materials, Materials Science and Engineering B, Journal of Materials Science, Journal of Crystal Growth, Optical Materials, si altele. Activitate didactica 2009-prezent: conducator de doctorate (6 doctorate finalizate, 2 doctoranzi inscrisi); profesor asociat la Scoala Doctorala a Facultatii de Fizica Bucuresti
Informații suplimentare	Membru în colective de redacție sau comitete științifice ale revistelor /manifestărilor științifice/naționale și internaționale 2015-Co-presedinte al celei de a 8-a editii a Conferintei Internationale pentru Materiale Avansate (ROCAM), Bucuresti, Romania, 7-10 iulie; organizator al sectiunii 3: Thin Films and Nanostructures of Functional Materials 2014-Co-presedinte si organizator principal al conferintei internationale Electroceramics XIV, Bucuresti, Romania, 16-20 iunie (see http://www.electroceramics14.com/) 2012-Membru in comitetul de organizare al cele de a 7-a editii a Conferintei Internationale pentru Materiale Avansate (ROCAM), Brasov, Romania, 28-31 august, organizator al sectiunii 4: Thin Films of Multifunctional Materials for Advanced Applications (see http://rocam.unibuc.ro/rocam2012/index1.html) 2010-Organizator al workshopului „Materiale multifunctionale micro si nanostructurate: de la cercetare la aplicatii” in cadrul celei de a 2-a editii a conferintei „Diaspora în Cercetarea Științifică Românească și Învățământul Superior”, Bucuresti, 21-24 septembrie 2010 2009- Membru in comitetul de organizare al cele de a 7-a editii a Conferintei Internationale pentru Materiale Avansate (ROCAM), Brasov, Romania, 25-28 august; organizator al sectiunii 5: Advanced functional oxide materials: characterization and applications (see http://rocam.unibuc.ro/rocam2009/) Peste 200 de lucrari publicate in jurnale si volume de conferinta; indice h 31 (Web of Science); 37 (Google Scholars); 27 lectii invitate; 5 brevete; 5 capitole de carti.

Anexe	Lista de proiecte		
2. Proiecte nationale si internationale, in calitate de director/responsabil			
Programul/Proiectul	Funcția	Perioada	Buget
SfP-971970-INOWATE “Integrated Optoelectronic Circuits for Infrared Wavelength Telecommunication”	Responsabil proiect partea Romana	1999-2004	250,000 RON
RELANSIN: Intelligent IR device for monitoring and controlling the particles in suspension in air and moisture in granular materials”	Director	2000 – 2002	150,000 RON
CERES: “Electronic processes in structures for detection of corpuscular and electromagnetic radiation” (Percol)	Director	2002-2004	270,000 RON
CERES: “Physical mechanisms of detection and associated measurements methods for the IR domain”	Director	2002 – 2004	230.000 RON
CERES: “Polar phenomena and charge transport in micro and nanostructured ferroelectric thin films” (POLTRANSF)	Director	2004-2006	110,000 RON
CEEX: “Complex phednomena and size effects in nanostructured thin films with ferroelectric and ferroic properties” (DINAFER)- DINAFER-2-CEEX-06-11-44	Director	2006 –2008	1,500,000 RON
IFA-CEA: “Investigation of metal-ferroelectric interface at macro and nanoscale”	Director	2010-2013	600,000 RON
FP7: “Interfacing oxides” (IFOX)	Responsabil partea Romana	2010-2015	2,400,000 RON
Ideas-PCCE: „Effect of interfaces on charge transport in ferroic/multiferroic heterostructures”	Director	2012-2015	7,000,000 RON
IFA-CEA: “Pyroelectricity in PZT thin films and multilayers”	Director	2014-2016	400,000 RON
Partnership: “Optimized pyroelectric materials through the polarization gradient concept and experimental model for a pyroelectric detector with potential for applications in monitoring high power/energy lasers.”	Director	2014-2016	1,200,000 RON
M-ERA NET: “Novel generation of pyroelectric detectors based on polar semiconductors”	Director	2015-2017	1,100,000 RON
POC-G: „Materiale multifunctionale inteligente pentru aplicatii de inalta tehnologie”	Director	2016-2021	15,950,000 RON
PFE-CDI: „Dezvoltare Institutionala pentru Cercetare de Excelenta in Domeniul Materialelor”	Director	2018-2020	6,900,000 RON
PCCF: „Controlul proprietatilor electronice in heterostructuri bazate pe perovskiti feroelectrici: de la teorie la aplicatii”	Director	2018-2022	8,500,000 RON
H2020: „Energy Efficient Embedded Non-volatile Memory & Logic based on Ferroelectric HfO ₂ and Hf _{0.5} Zr _{0.5} O ₂ ”	Responsabil pachet de lucru	2018-2021	310,125 EURO