

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

Raport anual Program Nucleu 2020 <u>Cercetari teoretice si experimentale in domeniul</u> <u>materialelor multifunctionale avansate pentru</u> <u>competitivitate economica si dezvoltare durabila</u> <u>(TEXMAV); PN19-03010</u>



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

RAPORT ANUAL DE ACTIVITATE privind desfăsurarea programului nucleu

<u>Cercetări teoretice și experimentale în domeniul materialelor multifuncționale</u> avansate pentru competitivitate economică si dezvoltare durabilă (TEXMAV); PN19-

> <u>03010</u> (denumire, acronim, cod) **anul 2020**

Durata programului: 4 ani Data începerii: 2019 Data finalizării: 2022

1. Scopul programului:

Objectivul principal:

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

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

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

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

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

Structurarea direcțiilor strategice de cercetare ia în considerare faptul că cercetarea fundamentală este cea care stă la baza progresului, indiferent dacă este vorba de cunoaștere sau de

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

• ECO-NANO-TEHNOLOGII ȘI MATERIALE AVANSATE

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

• TEHNOLOGIA INFORMAȚIEI ȘI A COMUNICAȚIILOR, SPAȚIU ȘI SECURITATE

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

• ENERGIE, MEDIU ȘI SCHIMBĂRI CLIMATICE

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

• SĂNĂTATE

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

• TEHNOLOGII NOI ȘI EMERGENTE

INCDFM va contribui, în strânsă relație cu participarea României, la unele mari proiecte de infrastructură care se dezvoltă în prezent atât în țară cât și în alte regiuni ale Europei. Exemplul cel mai la îndemană îl constituie proiectul ELI-NP, la care INCDFM va contribui cu cercetări privind obținerea unor materiale pentru acoperiri optice rezistente la fluxuri intense de radiație laser, sau la realizarea de ținte pentru experimentele avute în vedere în cartea albă a ELI-NP. De asemenea INCDFM va aduce contribuții, prin studii avansate de material sau de dispozitiv, și la dezvoltarea de noi detectori pentru CERN (colaborarea RD50), la elaborarea de noi tehnici de analiză a materialelor utilizând radiația sincrotron (ELETTRA, C-ERIC), sau la efectele pe care le are iradierea cu diferite tipuri de radiație (incluzând radiațiile ionizante) asupra materialelor cu impact tehnologic în diferite sectoare industriale.

• CERCETARE FUNDAMENTALĂ ȘI DE FRONTIERĂ

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

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

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

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

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

(c) Strategiile Regionale de Inovare Sud-Muntenia și Sud-Oltenia. O parte din rezultatele obținute în cadrul cercetării din INCD FM au aplicativitate în industria auto, ori în aceste regiuni se află localizate companiile Dacia-Renault, cel mai mare producător auto din țară, precum și Ford Craiova,

companie care se presupune că va trebui să-și susțină un program CDI ambițios pentru a ține pasul cu principalul competitor la nivel național.

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

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

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

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

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

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

categoriile expuse cum ar fi bătrâni sau bolnavi cronici, pot duce atât la scăderea cheltuielilor de sănătate dar și la creșterea standardului de calitate a vieții.

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

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

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

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

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

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

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

(q) În sfârșit, din nefericire, contextul geopolitic actual, precum și situarea României, din punct de vedere geografic, la periferia Uniunii Europene și în apropierea zonelor de conflict (Orientul MIjlociu și Ucraina) impun noi paradigme de securitate, indiferent dacă este vorba de neutralizarea substanțelor toxice, detecția contaminanților de orice natură, monitorizarea traficului fraudulos (de exemplu,

detectori de infrarosu ultrasensibili) sau chiar aplicații militare, în domeniul rachetelor sau apărării antiaeriene. În trecut, INCDFM a avut colaborări intense în domeniul aplicațiilor militare și este posibil ca aceste activități să fie reluate, în măsura în care industria militară autohtonă va solicita soluții rapide și fiabile pentru îmbunătățirea stării de siguranță națională. În cadrul institutului a fost dezvoltat un laborator de tip criminalistic în parteneriat cu structuri ale Ministerelor Afacerilor Interne din Romania și Bulgaria (SIAS și ISU și omologii bulgari) urmând ca pe viitor să fie dezvoltate și proceduri specifice în special legate de amenințările de tip CRBNE.

2. Modul de derulare al programului:

2.1. Descrierea activităților (utilizând și informațiile din rapoartele de fază, Anexa nr. 10) În anul 2020 fondurile alocate Programului Nucleu au fost împărțite în două tranșe.

Mai jos sunt prezentate activitățile (fazele) desfășurate în 2020 pe cele două proiecte componente, conform celor două tranșe de finanțare. Sunt trecute și fondurile alocate pentru fiecare fază și rezultatele previzionate.

Nr. Crt.	Cod proiect	Denumirea proiectului /	Valoare proiect /	Termen de încheiere al fazei	Rezultate estimate
		Nr. și denumire faze de execuție	Valoare fază de execuție (lei)		
	PN19- 030101	Cercetări teoretice și experimentale la frontiera cunoașterii în fizica stării condensate și al materialelor multifuncționale cu impact aplicativ în domenii de înaltă tehnologie și științele vieții			
1		Modelarea proprietăților structurale ale compușilor organometalici. Confirmări experimentale prin Rezonanță Nucleară Magnetică (RMN), absorbție de raze X (EXAFS) și difracție de raze X (XRD). <i>Responsabili: Dr. I.C.</i> <i>Ciobotaru, Dr. S. Poloșan</i>	1,000,000	martie	Rezultate estimate: a)Modelarea proprietăților structurale și electronice ale compușilor prin metode DFT pentru optimizarea sintezelor chimice; b)Sinteze ale compușilor organometalici prin metoda Nogoyama în pași succesivi; c)Măsurători de spectroscopie optică (absorbție, fluorescență, infraroșu și Raman, dicroism circular magnetic) pentru confirmarea propietăților structurale

r				
2	Investigarea impactului dopării	1 000 000	aprilie	și electronice ale compușilor; d)Măsurători de Rezonanță Nucleară Magnetică pentru evidențierea structurii liganzilor și aranjării acestora; e)Măsurători de absorbție de raze X (EXAFS) pentru determinarea distanțelor interatomice în moleculele organometalice; f)Măsurători de difracție de raze X pentru evidențierea structurii cristaline a acestor compuși, identificarea interacțiilor de tip π ® π * implicate în procesele de cristalizare și confirmarea distanțelor interatomice pe monocristale.
	asupra masei efective în heterostructuri multiferoice folosind spectroscopia de fotoelectroni cu rezoluție unghiulară (ARPES). <i>Responsabili: M. A. Huşanu, D.</i> <i>G. Popescu</i>	1,000,000	aprine	 a) Elucidarea efectelor care contribuie la renormarea masei efective; b) Înțelegerea modului în care pot fi controlați curenții de tunelare și conducția în joncțiuni multiferoice.
3	Realizarea de celule fotoelectrochimice pentru descompunerea apei. <i>Responsabil fază : Dr. M. Sima</i>	1,000,000	aprilie	Rezultate estimate: a) Se va prepara semiconductorul g- C3N4 atât ca pudră cât și ca film și se vor produce fotoanozi ce conțin fie g-C3N4 fie structuri hematita/TiO2/ g-C3N4; b) Celulele fotoelectrochimice obținute vor fi folosite la descompunerea fotoelectrochimica a apei.

4	Studiul efectelor hard/soft ale	1,000,000	mai	Rezultate estimate:
-	unor co-dopanti în	-,,		a) Se va studia influenta
	piezoceramicile de tip PZT			diferitelor concentratii
	Responsabil fază:			de co-dopanti asupra
	Dr. I. Amarandai			proprietăților morfo-
	Dr. L. Amaranaei			structurale dialactrica
				structurale, dielectrice,
				piezoelectrice și
				feroelectrice ale
				ceramicilor;
				b) Se va urmări
				corelația dintre
				concentrația/tipul
				dopanților, pe de o
				parte, și parametrii de
				rețea, concentrația
				fazelor cristaline în
				vecinătatea zonei
				morfotrope,
				proprietătile piezo- si
				feroelectrice. pe de altă
				parte, pentru o posibilă
				identificare a poziției
				dopantilor în structura
				perovskitică a PZT:
				c) Starea de oxidare a
				dopantilor în compus va
				fi studiotă prin DES si
				VDS nontru a nuna în
				AFS, penut a pune in
				evidența posibila
				compensare de sarcina
				prin modificarea starii
				de valență a co-
				dopanților;
				d) Materialele se vor
				prepara prin metoda
				reacției în faza solidă a
				precursorilor oxidici, în
				diverse condiții de
				calcinare (simplă/
				dublă) și sinterizare
				(cu/fără fază lichidă).
5	 Studii experimentale privind	1,000,000	iunie	Rezultate estimate:
	relaxarea structurală a filmelor			Se vor obtine filme
	epitaxiale feroelectrice			epitaxiale de oxizi
	Responsabili: I. Pasuk. L. Hrih.			feroelectrici de tip
	L. Trupina, L. Pintilie			perovskit PZT. BTO. ne
				diferite substraturi, ca
				de exemplu SRO/STO
				LSMO/STO STO
				STON si se va studia
				structura de domenii
				prin tehnici de difractio
				do rozo V do frolto
				ue raze A de maita
				rezoluție-inclusiv
				microdifracție și figuri
				de poli, microscopie de

				forță piezo și microscopie de înaltă rezoluție. Studiul relaxării structurale în filme epitaxiale feroelectrice și corelarea cu structură de domenii feroelectrice și cristaline.
6	Investigarea relației microstructură-proprietăți în materialele feroelectrice <i>Responsabil: L. Trupina</i>	1,000,000	iunie	Rezultate estimate: a) Creșterea straturilor subțiri feroelectrice prin metoda fizică de depunere din faza de vapori; b) Investigarea proprietăților feroelectrice la scară nanometrică prin microscopia de forță atomică cu răspuns piezoelectric.
7	Magneți durificați prin cuplaj de schimb bazați pe oxizi de fier <i>Responsabili faza:</i> Dr. S. Greculeasa, Dr. C. Comănescu	1,000,000	iulie	Rezultate estimate: a) Determinarea structurii locale și înconjurării specifice în sistemele de oxizi de Fe (identificarea diferitelor contribuții ale ionilor de Fe și a așezării cationice prin spectroscopie Mössbauer); b) Evidențierea cuplajului de schimb prin măsurători magnetice; c) Obținerea unui produs energetic maxim adecvat aplicațiilor precum magneți permanenți, înregistrare magnetică și absorbția de microunde.
8	Atenuatoare și defazoare cu materiale dielectrice pentru unde milimetrice și THz. <i>Responsabil: G. Banciu</i>	1,000,000	august	Rezultate estimate: a) Vor fi realizate materiale dielectrice cu proprietăți speciale în domeniul de frecvență solicitat; b) Prin simulări electromagnetice de tip "full wave" cu pachetele de programe

				HFSS si CST aflate
				deia în dotarea
				institutului vor fi
				propuse geometri noi
				pentru dispozitivele
				investigate;
				c) Caracterizarea
				modelelor
				experimentale se va
				face folosind
				analizoarele de
				microunde vectoriale
				A gilent dotate gu
				Agneni dotate eu
				extensilie de unde
				milimetrice precum și
				spectrometrul de THz
				în domeniu temporal.
9	Originea și proprietățile stărilor	1,000,000	august	Rezultate estimate:
	de margine chirale și nechirale		-	a) Rezolvarea ecuației
	în sisteme bidimensionale			Schrödinger pentru o
	complexe			retea hexagonală
	Responsabil: M Nită			modificatî (stres
	Responsabil. M. Mija			uniovial):
				$h = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} \sum_{i=1}^{n} \sum_{i=1}^{n} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} \sum_{i=1}^{n} \sum_{i=1}^{n} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} \sum_{i=1}^{n} $
				b) Elaborarea unui
				model teoretic pentru
				apariția stărilor de
				margine nechirale în
				rețele 2D din categoria
				grafenei;
				c) Calcul winding
				number si Brouwer
				index pentru sisteme
				1D si 2D (pentru
				sistema and not avea
				sisteme care pot avea
				stari de margine la
				modificarea condițiilor
				la capete).
10	Cercetări experimentale privind	1,000,000	august	Rezultate estimate:
	prepararea și caracterizarea		5	a) Materialele
	unor nanostructuri compozite			compozite care vor fi
	multifunctionale-			obtinute vor fi
	niezoelectrice/feroelectrice ou			caracterizate din nunct
	arhitectură de tin core-shell			de vedere structural
	Desponsabil. Du M. Comment			morfologia far-1-tr
	Kesponsaou: Dr. M. Cernea			inoriologic, leroelectric
				și ieromagnetic in
				vederea testării
				multifuncționalității lor;
				b) Aplicațiile acestor
				compozite sunt
				numeroase:
				condensatoare, senzori
				piezoelectrici
				dispozitive
				magnetoelectronice,
				dispozitive spintronice,
				nanogeneratorul

				piezoelectric pe baza nanofirelor de BNT și CoFe2O4, senzori de câmp magnetic, etc.
11	Compozite metalo ceramice stabile termochimic pentru aplicatii la temperaturi inalte <i>Responsabili: M. Galatanu, Dr.</i> <i>A Galatanu</i>	1,000,000	septembrie	Rezultate estimate: a) Obținerea și caracterizarea unor noi materiale compozite cu proprietăți îmbunătățite pentru aplicații la temperaturi înalte; b) Determinarea și realizarea unor noi functionalități pentru compozite metalo- ceramice avansate.
12	Studiul proprietăților duale, hipertermice și fotocatalitice, ale unor sisteme nanocompozite de tip metal-/oxid magnetic- TiO2 cu potențial aplicativ în terapii antitumorale combinate. <i>Responsabili: Dr. T. Popescu,</i> <i>Dr. G. Schînteie, A Rostas.</i>	1,100,000	octombrie	Rezultate estimate: a) Obținerea de sisteme nanocompozite de tip metal-/oxid magnetic- TiO2 cu conținut de faze și proprietăți morfo-structurale diferite prin controlul hidrolizei alcoxizilor de titan și varierea condițiilor de tratament post-hidroliză; b) Evaluarea proprietăților magnetice, hipertermice și fotocatalitice ale fazelor componente; c) Evaluarea separată și concomitentă a proprietăților hipertermice și fotocatalitice ale nanocompozitelor sintetizate; d) Stabilirea implicării speciilor reactive de oxigen generate în mediul de reacție în activitatea fotocatalitică a nanocompozitelor în absența/prezența câmpurilor magnetice externe; e) Stabilirea nivelului de citotoxicitate al nanocompozitelor în absența agenților activatori (i.e iluminare LIV câmp magnetice

				alternativ).
13	Sisteme magnetice low-cost fără pământuri rare, cu proprietăți similare fazelor tetragonale L10. (fază nouă) <i>Responsabil fază: Dr. O. Crișan</i>	1,100,000	octombrie	Rezultate preconizate: a) Sinteza de materiale magnetice nanocompozite pe bază de MnAl(Fe), MnAl(Fe)Bi cu ordonare structurală la scară nanometrică; b) Caracterizarea structurală și morfologică a magneților nanocompoziți obținuți, optimizarea prin tratament termic a microstructurii de granule obtinute; c) Caracterizarea din punct de vedere al proprietăților magnetice și de transport electronic; corelarea parametrilor magnetici cu proprietățile morfo- structurale.
14	Studii privind proprietățile straturilor subțiri din bazele acizilor nucleici ca biomateriale pentru aplicații în electronică <i>Responsabil: Dr. C. Breazu</i>	1,100,000	noiembrie	Rezultate estimate: a) Obținerea de straturi subțiri din guanină, citozină și uracil prin metoda evaporării în vid pe diferite substraturi (transparente, Si); b) Caracterizarea optică, structurală, morfologică a straturilor depuse; c) Realizarea heterostructurilor cu strat din baze ale acizilor nucleici; d) Investigarea proprietăților de transport a purtătorilor de sarcină prin aceste heterostructuri; e) Studierea efectului unui strat tampon dintr- un conductor organic plasat între electrod și stratul din nucleobază asupra proprietăților electrice; f) Investigarea efectului

				iluminării asupra comportării heterostructurii, o lucrare științifică trimisă spre publicare la un jurnal indexat Web of Science®.
15	Multistraturi Langmuir- Blodgett pe bază de acizi grași și nanotuburi de carbon, dopate cu metaloporfirine. Sinteză, caracterizare și aplicații în senzoristică. <i>Responsabil fază nucleu: Dr.</i> <i>I.D. Şimăndan</i>	1,100,000	noiembrie	Rezultate estimate: a) Dezvoltarea de materiale organice complexe depuse prin tehnica Langmuir Blodgett. b) Vor fi sintetizate multistraturi Langmuir Blodgett pentru recunoașterea de substanțe chimice toxice în aer și/sau de radiații ultraviolete. Materialul sensibil se va baza pe multistraturi ordonate Langmuir - Blodgett de săruri metalice ale acidului stearic combinate cu structuri nanocarbonice și metalo-porfirine. c) Se vor prepara cu ajutorul metodei Langmuir Blodgett, diverse filme cu grosimi nanometrice si se vor combina în diferite concentrații săruri metalice ale acizilor grași, structuri nanocarbonice și metaloporfirine.
16	Material nanocompozit pe bază de calcogenic și porfirine hidrofobe pentru senzori de gaze toxice sau explozive <i>Responsabil : A. Lorinczi</i>	1,100,000	noiembrie	Rezultate estimate: Caracterizarea materialului compozit nou din punct de vedere structural (XRD), a topografiei suprafeței (SEM), structura compozițională a interfeței de contact a stratului subțire cu gazele de test (XPS), răspunsul rezistiv la gaze cu și fără prezența vaporilor de apă.

17		Studiul defectelor extinse și a interfețelor în heterostructuri feroelectrice epitaxiale fără plumb <i>Responsabil fază: Dr. R. F.</i> <i>Negrea</i>	1,000,000	decembrie	Rezultate estimate: a) Se vor efectua studii structurale folosind difracția de electroni și microscopia electronică prin transmisie convențională și de înaltă rezoluție; b) Se vor analiza interfețele între straturi folosind EELS-SI la rezoluție atomică și se vor studia defectele extinse prezente.
	PN19- 030102	Dezvoltarea de metode teoretice și numerice avansate și de programe de formare profesională pentru investigarea unor procese din fizică și domenii conexe	550,000		
18		Testarea invariantei Lorentz din studiul dezintegrării beta duble <i>Responsabil Dr.S. Stoica</i>	200,000	iunie	
19		Tutorial pentru metode teoretice avansate în optica cuantică mezoscopică <i>Responsabili: Dr. V.</i> <i>Moldoveanu, Dr.V. Dinu</i>	91,261	decembrie	
Total pro	gram-Tranșa 1	:	17,791,261		

Nr. Crt.	Cod proiect	Denumirea proiectului /	Valoare proiect /	Termen de încheiere al fazei	Rezultate estimate
		Nr. și denumire faze de execuție	Valoare fază de execuție (lei)		
	PN19-030101	Cercetări teoretice și experimentale la frontiera cunoașterii în fizica stării condensate și al materialelor multifuncționale cu impact aplicativ în domenii de înaltă tehnologie și științele vieții	4,022,338		

20	Faza 44 - Modelări teoretice ale	1,000,000	10.12.2020	Rezultate estimate:
	efectelor magneto-mecanice în			a) Elaborarea
	nanomagneți moleculari sau			formalismului de
	artificiali			transport pentru
	Responsabili: V. Moldoveanu, I.			nanomagneti artificiali în
	V Dinu			prezenta unui
	, , 2, , , , , , , , , , , , , , , , ,			nanorezonator (posibilă
				adaptare și implementare
				numerică a teoriei
				Floquet pentru operatori
				Lindhlad dincolo de
				equatia Redfield):
				b) Obtinerea și analiza
				structurii spectrale a
				situctul in spectrale a
				sistemului cupiat;
				modurilor vibronice in
				procesul de transport;
				d) Identificarea efectelor
				specifice regimului
				tranzitoriu (nemarkovian)
				și evidențierea canalelor
				de transport activate de
				benzile vibraționale
				laterale (vibrational
				sidebands);
				e) discutarea efectelor
				anizotropiei magnetice și
				ale temperaturii.
21	Faza 45 - Descompunerea	1,100,000	10.12.2020	Rezultate estimate:
	fotoelectrocatalitică a apei cu			Optimizarea raportului
	ajutorul unor sisteme			dintre componentele
	fotocatalitice tricomponente			sistemului fotocatalitic
	optimizate.			astfel încât randamentul
	Responsabili: Dr. Ş. Neațu, Dr. F.			reacției
	Neațu			fotoelectrocatalitice a
				apei să fie cât mai mare
				la un cost total cât mai
				mic posibil.
22	Faza 46 - Sinteza și caracterizarea	822,338	10.12.2020	Rezultate estimate:
	hidroxiclorurii de zinc, o			a) Se va sintetiza
	alternativă interesantă pentru			hidroxiclorura de zinc si
	obtinerea nano si micro			se vor caracteriza
	particulelor de oxid de zinc			proprietătile morfo-
	Responsabil: A. M. Rostas, I.D.			structurale si stabilitatea
	Vlaicu			termo-chimica la
				tratamente termice in aer:
				b) Se vor utiliza multiple
				tehnici de analiza : XRD
				TEM, FTIR, RES:
				c) Tranzitia de fază
				structurală se va nune în
				evidentă cu precizie mare
				prin experimente RFS pe
				probe tratate termic:
				d) Caracierizarea reactiei

					de formare a oxidului de zinc folosind RES la diferite temperaturi de sinteză.
23		Faza 47 - Straturi subțiri nanostructurate din supraconductori cu temperatură critică ridicată <i>Responsabili fază : Dr. A. Crisan</i>	1,100,000	10.12.2020	Rezultate estimate: a) Se vor determina materialele și arhitecturile optime pentru îmbunătățirea capabilității de transport fără pierderi a curentului electric în câmpuri magnetice intense; b) Contribuții la studiul dinamicii și fixării vortexurilor în nanocompozitele supraconductoare.
	PN19-030102	Dezvoltarea de metode teoretice și numerice avansate și de programe de formare profesională pentru investigarea unor procese din fizică și	258,739		
24		Faza 3b - Construirea spectrelor de energie a electronilor și constrângerea valorii parametrului ce guvernează mărimea violării invariantei Lorentz în dezintegrea beta dublă <i>Responsabil: Dr. S. Stoica</i>	129,369	10.12.2020	Rezultatele estimate: a) Obținerea spectrelor energetice de emisie a electronilor și a modificărilor lor datorate violării invariantei Lorentz, asociate factorilor de spațiu de fază; b) Constrângerea domeniului de valori ale parametrului ce guvernează mărimea violării invariantei Lorentz în dezintegrea beta dublă.
25		Faza 4b - Tutorial pentru metode teoretice pe baza modelului Rabi cuantic <i>Responsabili: Dr. V. Moldoveanu</i>	129,370	10.12.2020	Rezultate estimate: a) Evidențierea rezultatelor experimentale recente în regim de cuplaj puternic; b) Analiza spectrală a Hamiltonianului Rabi

			(studiu analitic și numeric); c) Analiza dinamicii sistemelor hibride în regimul de cuplaj puternic.
Total pro	gram-Tranşa 2:	4,281,077	

2.2. Proiecte contractate:

Cod obiectiv	Nr. proiecte contractate	Nr. proiecte finalizate	Anul 2020
1. PN19-030101	2	0	22,072,338.00
Total:	2	0	22,072,338.00

2.3 Situația centralizată a cheltuielilor privind programul-nucleu : <u>Cheltuieli</u> în lei

	Anul 2020	
I. Cheltuieli directe	14,714,578	
1. Cheltuieli de personal	11,492,680	
2. Cheltuieli materiale și servicii	3,221,898	
II. Cheltuieli Indirecte: Regia	7,074,773	
III. Achiziții / Dotări independente din care:	282,987	
1. pentru construcție/modernizare infrastructura		
TOTAL (I+II+III)	22,072,338	

INCDFM	Et I	Et II	
I. Cheltuieli directe	11,800,006	2,599,651	14,399,657
1. Cheltuieli de personal	10,650,006	612,014	11,262,020
2. Cheltuieli materiale și servicii	1,150,000	1,987,637	3,137,637
II. Cheltuieli Indirecte: Regia	5,699,994	1,219,823	6,919,817
III. Achiziții / Dotări independente din care:	0	202,864	202,864
1. pentru construcție/modernizare infrastructura			
TOTAL (I+II+III)	17,500,000	4,022,338	21,522,338
CIFRA	Et I	Et II	
I. Cheltuieli directe	195,842	119,079	314,921
1. Cheltuieli de personal	194,842	35,818	230,660
2. Cheltuieli materiale și servicii	1,000	83,261	84,261
II. Cheltuieli Indirecte: Regia	95,420	59,537	154,956
III. Achiziții / Dotări independente din care:	0	80,123	80,123
1. pentru construcție/modernizare infrastructura			
TOTAL (I+II+III)	291,262	258,739	550,000

3. Analiza stadiului de atingere a obiectivelor programului

(descriere)

Indicatori specifici pentru monitorizare și evaluare (valori minime asumate), așa cum apar în Anexa 1. la Ordinul MCI nr. 924/30.10.2018:

- Studii și documentații pentru noi tehnologii, echipamente și metode: 4

- Formule, rețete, scheme, produse și tehnologii (la nivel de material, tehnologie sau demonstrator produs în laborator): **30**

- Lucrări publicate în jurnale ISI: 500

- Cereri de brevet depuse: **30**

- Aplicații de proiecte: 25 (depinde și de ritmicitatea competițiilor)

- Tineri cercetători angajați în institut: 10

- Instituții colaboratoare din țară și străinătate: 30

- Cercetători din străinătate care vin pentru stagii de lucru în INCDFM: 10

- Firme contactate pentru valorificarea rezultatelor: **30** (domenii: electronică; auto; IT; securitate; energetică; echipamente și automatizări; medicină; protecția mediului)

- Prezentări la conferințe: **300**

Indicator	Valoare asumată la final	Valoare realizată în	Valoare realizată în 2020	Grad de realizare (%)	Observații/Detalieri
	Program Nucleu (2022)	2019 (primul an)	(al doilea an)		
Studii și documentații pentru noi tehnologii, echipamente și metode	4	2	3	120	Fazele 4, 7 și 12 din planul de realizare
Formule, rețete, scheme, produse și tehnologii (la nivel de material, tehnologie sau demonstrator produs în laborator)	30	9	9	60	Fazele 3, 8, 10, 11 13, 16, 19, 1 și 22 din planul de realizare
Lucrări publicate în jurnale ISI	500	180	167	69.4	Se menține o medie de publicații ISI în jur de 170, înregistrările ISI se fac însă până în martie anul următor, deci numărul va fi mai mare.
Cereri de brevet depuse	30	21	20	137	Mai sunt și 4 modele de utilitate, 2 brevete UPTO cesionate, 8 brevete acordate în 2020
Aplicații de proiecte	25	159	51	828	Au fost depuse 39 de proiecte la competiția PCE, 2 la competiții ERC- H2020, 5 la M-ERA NET, 2 la ELI-NP

					(IFA), 3 la Soluții
Tineri cercetători angajați în institut	10	6	13	190	Dintre noii angajați, 2 sunt din Maroc și unul din Brazilia, care se adaugă unor cercetători din Franța, Portugalia, Mauritania care lucrează deja în INCDFM de câțiva ani.
Instituții colaboratoare din țară și străinătate	30	42	70	373	64 instituții colaboratoare sunt numai în colaborarea RD50- CERN, în care INCDFM coordonează unul din pachetele de lucru.
Cercetători din străinătate care vin pentru stagii de lucru în INCDFM	10	12	8	200	6-Bursieri AUF; 1 Bursier ICTP- Trieste; I bursier cu bursă din țara natală, Algeria.
Firme contactate pentru valorificarea rezultatelor	30	17	5	73	Sunt 5 firme pentru care s-au prestat servicii de cercetare, sau cu care s-au inițiat discuții privind viitoare colaborări.
Prezentări la conferințe	300	161	30	64	Anul 2020 a fost atipic din cauza pandemiei COVID- 19 și a restrucțiilor impuse privind deplasările și evenimentele publice. Multe conferințe au fost anulate (ex. EMRS de primavară și toamnă, ECAPD), altele au fost mutate în 2021 (ex. ROCAM). Au fost câteva conferințe care au fost organizate on-line, printre care și cele 2 workshopuri organizate de către INCDFM.

Se poate constata că indicatorii asumați în propunerea de Program Nucleu transmisă la competiția organizată la începutul anului 2019 au un grad de îndeplinire de cel puțin 60 %, în condițiile în care actualul Program Nucleu se întinde pe 4 ani, până la finalul anului 2022.

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

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

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

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

Mai menționăm că rezultatele prezentate mai sus au fost obținute în condițiile în care finanțarea pentru anii 2019-2020 a fost sub cea solicitată prin propunerea transmisă la competiție. Mai mult, finanțarea în 2020 a fost mai mică decât în 2019, deși suma cuvenită conform veniturilor realizate în cei 3 ani anteriori este consistent mai mare.

O altă mențiune trebuie făcută în legatură cu anul 2020, când activitatea experimentală a fost grav afectată de restricțiile impuse datorită crizei COVID-19. Restricțiile de circulație, carantinarea, au dus nu numai la anularea multor evenimente științifice, dar și la anularea unor stagii de lucru la infrastructuri experimentale din străinătate (ex. la sincrotroane). În plus, necesitatea evitării aglomerațiilor a dus la eșalonarea experimentelor și a accesului la anumite echipamente, ceea ce a dus la unele întârzieri în acumularea datelor necesare redactării de noi publicații și cereri de bevet de invenție.

4. Prezentarea rezultatelor:

4.1. Stadiul de implementare al proiectelor componente

Denumirea proiectului	Tipul rezultatului estimat	Stadiul realizării proiectului
1. Cercetări teoretice și	(studiu proiect, prototip, tehnolog,	În grafic, grad de realizare estimat 60 %
experimentale la frontiera	etc., alte rezultate)	
cunoașterii în fizica stării	3 studii; 9 formule, rețete,	
condensate și al materialelor	materiale; 167 lucrări publicate în	
multifuncționale cu impact	jurnale indexate ISI și alte 8 lucrări	
aplicativ în domenii de	în alte publicații; cereri de brevet și	
înalta tehnologie și științele	modele de utilitate.	
vieții		

2. Dezvoltarea de metode	2 tutoriale; 2 lucrări ISI	În grafic, grad de realizare estimat 55 %
teoretice și numerice		
avansate și de programe de		
formare profesională pentru		
investigarea unor procese		
din fizică și domenii conexe		

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

<u>Titlu Fază</u>: Modelarea proprietăților structurale ale compușilor organometalici. Confirmări experimentale prin Rezonanță Nucleară Magnetică (RMN), absorbție de raze X (EXAFS) și difracție de raze X (XRD)

Termen: 14.04.2020

Objective:

a) Modelarea proprietăților structurale și electronice ale compușilor organometalici pe bază de iridium și aluminiu;

b) Sinteze și caracterizări spectroscopice ale compușilor obținuți;

c) Experimente de rezonanță magnetică nucleară pe soluții ale acestor compuși:

d) Măsurători de difracție de raze X pentru confirmări experimentale a modelelor teoretice propuse pentru acești compuși;

e) Măsurători de absorbție de raze X (EXAFS) pentru determinarea structurii moleculare a acestor compuși.

Rezultate estimate inițial:

a) Modelarea proprietăților structurale și electronice ale compușilor prin metode DFT pentru optimizarea sintezelor chimice;

b) Sinteze ale compușilor organometalici prin metoda Nogoyama în pași succesivi;

c) Măsurători de spectroscopie optică (absorbție, fluorescență, infraroșu și Raman, dicroism circular magnetic) pentru confirmarea proprietăților structurale și electronice ale compușilor;

d) Măsurători de Rezonanță Nucleară Magnetică pentru evidențierea structurii liganzilor și aranjării acestora;

e) Măsurători de absorbție de raze X (EXAFS) pentru determinarea distanțelor interatomice în moleculele organometalice;

f) Măsurători de difracție de raze X pentru evidențierea structurii cristaline a acestor compuși, identificarea interacțiilor de tip $\pi \rightarrow \pi^*$ implicate în procesele de cristalizare și confirmarea distanțelor interatomice pe monocristale.

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

Construcția spectrului de absorbție a IrQ(ppy)₂ s-a realizat prin convoluția gaussienelor calculate cu ajutorul ecuației Schrodinger dependente de timp (TD-DFT) prin care s-au calculat poziția acestor maxime în scară energetică și taria de oscilator pentru nivelele de singlet în scară Oy. Tabelul 1 prezintă energiile stărilor de singlet în eV (coloana 2) și tăriile de oscilator al fiecarei tranziții (coloana 3).

All SINGLET-SINGLET excitation energies

no.	E/a.u.	E/eV	f	Symm
1.	0.07348	1 000//	0 8210	
2.	0.07040	2 19010	0.02150	-03 A
2.	0.08012	2.18010	0.10956	-02 A
3:	0.08030	2.18517	0.108/	:-02 A
4:	0.08715	2.37144	0.1944	-01 A
5:	0.08751	2.38132	0.2167	-01 A
6:	0.08889	2.41893	0.3278	-02 A
7:	0.09112	2.47949	0.85958	-03 A
8:	0.09499	2.58471	0.7746	-02 A
9:	0.09513	2.58858	0.7350	-02 A
10:	0.09853	2.68119	0.2757	E-01 A
11:	0.09867	2.68492	0.2878	E-01 A
12:	0.10192	2.77326	0.2555	E-01 A
13:	0.10199	2.77541	0.3067	E-01 A
14:	0.10205	2.77679	0.2460	E-01 A
15:	0.10963	2.98317	0.7453	E-02 A
16:	0.10977	2.98703	0.1013	E-01 A
17:	0.10982	2.98830	0.1019	E-01 A
18:	0.11094	3.01891	0.9651	E-02 A
19:	0.11866	3.22883	0.4710	E-03 A
20:	0.11897	3.23740	0.3289	E-03 A

Tabel 1. Pozițiile energetice și tăriile de oscilator determinate din DFT și comparație cu spectrul de absorbție (figura 1).



Figura 1. Absorbția IrQ(ppy)² dispersat în polistiren

Distanțele interatomice au fost determinate din măsurători de absorbție de raze X pe pulbere de $IrQ(ppy)_2$. Absorbția de raze X se realizează în urma tranziției Ir $2p_{3/2} \rightarrow 5d_{3/2,5/2}$ cunoscută ca linia Ir-LIII la energii de 11200-11280 eV. Împrăștierea razelor X pe atomii vecini iridiului, adică C, N, O permire determinarea distanțelor atomice Ir-C, Ir-O și Ir-N dar nu și indentificarea acestora deoarece C,N și O au aproximativ același număr atomic Z. Spectrul de absorbție și transformata Fourier în distanțe interatomice sunt date în tabelul 6. Aceste date sunt comparate cu datele de cristalografie obținute prin difracție de raze X.

Tabelul 6.

	Structural Model based on XRD ^a	EXAFS ^b		
	N / R (Å)	Ν	R (Å)	$\sigma^{2}(\text{\AA}^{2}) \times 10^{-3}$
1 st shell	1 O / 2.15 Å 1 N / 2.13 Å 2 N / 2.03 Å 2 C / 2.03 Å	6 (C,N,O)	1.97± 0.02 Å	10±3
2 nd shell	11 C / 2.98 Å	5 C 6 C	2.63± 0.02 Å 2.96± 0.03 Å	8±3 6±2

Comparația între compusul intermediar, compusul final $IrQ(ppy)_2$ și al celor doi liganzi, 8hidroxichinolina și 2-fenirpiridina s-a realizat prin masurători de cromatografie de lichide în care timpul de retenție este proporțional cu polarizarea moleculară, adică cele mai polare molecule au un timp de retenție mic iar cele mai puțin polare au un timp de retenție mare. Spectrul experimental este dat în figura 11.



Figura 11. Retenția moleculelor în cromatografia de lichide.

Modelarea teoretică s-a făcut prin optimizarea fiecărui compus cu ajutorul DFT implementat în Gaussian 03W. Astfel, polarizarea calculată pentru fiercare compus este dată în tabelul IV.

Tabelul 4.

Moleculă	Intermediar	IrQ(ppy) ₂	8-hidroxichinolină	2-fenilpiridină
Polarizare (Debye)	12.59 D	5.64 D	2.59 D	1.19 D

Concluzii și perspective:

Modelările teoretice au permis estimarea unor proprietăți macroscopice ale moleculor de IrQ(ppy)₂ după cum urmează:

a) Determinarea energiei minime a moleculor- stabilitatea chimică, polarizare, distribuții de sarcină, orbitali, densități de stări;

b) Calcularea stărilor excitate de single și de triplet –ca poziție în spectrele de absorbție (energie stare, tip stare, tărie de osc.);

c) Introducerea cuplajului de tip spin-orbită- determinarea tăriei de oscilator pentru stări de triplet;

d) Determinarea timpilor de viață a stărilor excitate;

e) Determinarea stărilor vibraționale-spectre Raman și FTIR;

f) Determinarea distanțelor interatomice prin optimizarea energetică a moleculelor construite pe baza difracției de raze X;

g) Calculul polarizabilității moleculelor și compararea cu datele de cromatografie de lichide;

f) Determinarea deplasărilor chimice a protonilor H, C, etc.

<u>Titlu Fază</u>: Investigarea impactului dopării asupra masei efective în heterostructuri multiferoice folosind spectroscopia de fotoelectroni cu rezoluție unghiulară (ARPES)

Termen: 15.04.2020

Objective:

Investigarea proceselor de renormare a masei efective a electronilor la interfața metal-feroelectric. **Rezultate estimate inițial**:

a) Elucidarea efectelor care contribuie la renormarea masei efective;

b) Înțelegerea modului în care pot fi controlați curenții de tunelare și conducția în joncțiuni multiferoice.

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

Experimentele de spectroscopie de fotoelectroni rezolvate unghiular (ARPES) desfășurate la facilitatea cu radiație de sincrotron Swiss Light Source au permis obținerea proprietăților electronice pentru PZT(P-)/LSMO și PZT(P+)/LSMO, ce au fost comparate cu semnatura în ARPES a suprafețelor libere, nemodificate de prezența stratului FE. Orientarea P+ a stratului de PZT a fost obținută prin depunerea pe LSMO/STO (P1) respectiv P- atunci când PZT este depus pe LSMO/SRO/STO (P2). Figura 1 ilustrează semnatura spectrală a LSMO(111) orientat după direcția ΓK (d) și ΓM (e). Legătura dintre simetria obținută prin depunerea după direcția (111) și cea mai bine cunoscută a LSMO(001) este prezentată în Fig. 1 f) și g). Orientarea (111) permite acum extragerea dispersiei benzilor de energie E(k) atât pentru electroni (în Γ) cât și pentru goluri (în punctele K din spațiul reciproc).



Figura 1 Geometria (111) a LSMO văzută de-a lungul axei z, indicând geometria hexagonală (a) și de-a lungul axei x, indicând cele două terminații posibile (b). Spațiul reciproc, corespunzător simetriei hexagonale a sistemului este ilustrat în (c) iar suprafețele izoenergetice la energia Fermi pentru P1 sunt prezentate în (d) pentru direcția ΓK și în (e) pentru ΓM . Simetria suprafaței Fermi în cazul LSMO (111) (g) rezultă imediat din cea cunoscută a LSMO(001) (f)

Concluzii și perspective:

Obiectivele propuse, respectiv acela de a întelege care sunt mecanismele implicate în controlul masei efective a purtătorilor metal/feroelectric și care este impactul lor asupra curenților de tunelare și conducției la interfață au fost indeplinite integral. Rezultatele reprezintă un pas esențial în realizarea de dispozitive electronice pe platforme alternative celor de Si.

În momentul de față o prima lucrare ("Band-order anomaly at the γ -Al₂O₃/SrTiO₃ interface drives the electron-mobility boost" A. Chikina et al.), ce studiază impactul polaronic de tip Holstein asupra mobilității la interfața oxizilor a fost trimisă spre publicare la Nature Physics în timp ce o a doua, detaliind mecanimsul cuplajului polaronic de tip Frohlich în LSMO este în curs de pregătire și va fi trimisă spre publicare în cursul anului 2020.

<u>**Titlu Fază:</u>** Realizarea de celule fotoelectrochimice pentru descompunerea apei **Termen:** 15.04.2020</u>

Objective:

Fabricarea de celule fotoelectrochimice bazate pe fotoanozi ce conțin semiconductorul nemetalic g-C₃N₄ (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.

Rezultate estimate inițial:

Se va prepara semiconductorul g- C_3N_4 atât ca pudră cât și ca film și se vor produce fotoanozi ce conțin fie g- C_3N_4 fie structuri hematita/ TiO_2 / g- C_3N_4 . Celulele fotoelectrochimice obținute vor fi folosite la descompunerea fotoelectrochimică a apei. Se vor elabora trei lucrări științifice.

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

Pudra de g-C₃N₄ a fost sintetizată prin piroliza ureei într-un cuptor. 3g de pudră de uree a fost pusă într-un creuzet de 50 ml cu capac și a fost încălzită până la 520 0 C în 15 min și ținută la această temperatură 15 min. În procesul de răcire, proba a fost scoasă din cuptor la 400 0 C și lăsată la temperatura camerei. Produsul obținut a fost dispersat în apă distilată și a fost spălat prin ultrasonare și centrifugare de trei ori consecutiv. În final produsul a fost uscat peste noapte într-o etuva la 100 0 C. S-a obținut o pudra alb-pal (Fig.1) care a fost apoi dispersată în metanol, 2 mg/ml, prin ultrasonare timp de 5 min. S-a obținut o dispersie transparentă după un proces de îmbătrânire de trei zile. Dispersia de g-C₃N₄ în metanol a fost pulverizată pe substratul de FTO încălzit la 50 0 C. După depunere, filmele de g-C₃N₄ (Fig.1) au fost tratate termic la 300 0 C timp de 30 min.



Figura1: Pudră de g-C₃N₄ (stângă). Dispersia metanolica a g-C₃N₄ a fost pulverizată pe substrat *FTO* (dreapta).

Pentru obținerea structurilor FTO/TiO₂/g-C₃N₄ au fost depuse pe FTO prin centrifugare (2000 rpm, 60 s) straturi de TiO₂ mesoporos folosind pasta comerciala Dyesol 18NR-T diluată cu etanol (1/6 în greutate). Apoi probele au fost tratate termic 1h la 550 $^{\circ}$ C.

Straturile de hematită (Fe₂O₃) și g-C₃N₄ au fost obținute prin pulverizarea unei soluții de 0.02M acetilacetonat de Fe(III) în metanol, respectiv a dispersiei de 2 mg de g- C₃N₄ într-un ml de metanol pe un substrat încălzit la 500 C. Structura Fe₂O₃/g-C₃N₄ s-a obținut prin depunerea unui prim strat de Fe₂O₃ (timp de pulverizare 240 s) după care s-a depus un strat de g-C₃N₄ și a unui alt strat de Fe₂O₃ (timp de pulverizare 30 s). În Tabelul 2 sunt prezentate codurile probelor ce conțin filme de Fe₂O₃ și Fe₂O₃/g-C₃N₄.

Curbele I-V din figura de mai jos arată că probele ce conțin hematită și azotură de carbon grafitică dau cele mai mari densități de fotocurent la 1.23V vs RHE în soluția 0.5 M Na₂SO₄, pH=7: 13.3µA/cm². Această comportare a fost atribuită formării de filme subțiri cu buna expunere a marginilor nanofoitelor de g-C₃N₄ la lumină și soluție (fără suprapuneri), care favorizează procesul fotocatalitic.



AM1.5 solar simulator,

(b) reprezentarile Nyquist ale spectrelor de impedanta (cu circuitul echivalent folosit la simularea mecanismului fotoelectrochimic) pentru probele H1-H5 in solutia 0.5 M Na₂SO₄, pH=7.

Concluzii și perspective:

În cadrul acestei faze au fost obținuți fotoanozi de azotură de carbon grafitică (g-C₃N₄), TiO₂/g-C₃N₄ și Fe₂O₃/g-C₃N₄ în care filmele de g-C₃N₄ și hematită au fost obținute prin pulverizare iar cele de TiO₂ prin spin-coating. Caracteristicile morfologice și structurale ale filmelor au fost măsurate. Performanțele structurilor preparate, utilizate ca fotoanozi au fost evaluate din curbele fotocurent-potențial și măsurători de spectroscopie de impedanță. S-a observat că realizarea heterostructurilor TiO₂/g-C₃N₄ și Fe₂O₃/g-C₃N₄ determină o creștere a fotocurenților în procesul de oxidare a apei iar măsurătorile de spectroscopie de impedanță au permis identificarea proceselor care contribuie decisiv la răspunsul fotoelectrochimic al fotoanozilor (în special, diminuarea rezistenței transferului de sarcină). Obiectivele fazei au fost indeplinite integral. Studiul va continua în direcția optimizării fotoanozilor bazați pe heterostructuri ce conțin azotură de carbon grafitică în urma unor noi procese de sinteză și de nanostructurare.

Rezultatele obținute în cadrul fazei au fost publicate în trei lucrări științifice:

[1] M. Sima, E. Vasile, A. Sima, N. Preda, C. Logofatu, "Graphitic carbon nitride based photoanodes prepared by spray coating method" International Journal of Hydrogen Energy 44 (2019) 24430-24440.

[2] E. Vasile, M. Sima, A. Sima, C. Logofatu "TiO₂/Fe₂O₃ photoanodes for solar water oxidation prepared via electrodeposition of amorphous precursors", Materials Research Bulletin 121 (2020) 110623.

[3] M. Sima, E. Vasile, A. Sima, "Investigation of the photoelectrochemical behavior of nanocarbon/mesoporous TiO₂ films", Digest Journal of Nanomaterials and Biostructures 14 (2019) 935-941.

<u>**Titlu Fază:</u>** Studiul efectelor hard/soft ale unor co-dopanți în piezoceramicile de tip PZT **Termen:** 15.05.2020</u>

Objective:

Obiectivul fazei a fost studiul caracterului piezoelectric hard/ soft imprimat de unii co-dopanți cu valență multiplă sau care pot intra ca substitutenți pe ambele poziții cationice ale structurii perovskitice, în ceramici piezoelectrice pe bază de titanat zirconat de plumb (PZT). S-a urmărit în principal corelația dintre valența, localizarea și concentrația acestor co-dopanți și caracteristicile materialului, precum și evidențierea unei posibile compensări de sarcină între co-dopanți prin modificarea stării de valență a acestora. Acest studiu este util pentru a întelege mai bine mecanismele prin care dopanții modelează proprietățile PZT, pentru diverse aplicații.

Rezultate estimate inițial:

Obținerea și caracterizarea unor piezoceramici din PZT co-dopat cu stibiu și mangan. Obținerea unor rezultate experimentale care să permită studiul influenței diferitelor concentrații de co-dopanți asupra proprietăților morfo-structurale, dielectrice, piezoelectrice și feroelectrice ale ceramicilor.

Stabilirea corelației dintre concentrația/tipul dopanților, pe de o parte, și parametrii de rețea, concentrația fazelor cristaline în vecinatatea zonei morfotrope, proprietățile piezo- și feroelectrice, pe de altă parte, pentru o posibilă identificare a poziției co-dopanților în structura perovskitică a PZT. Determinarea stării de oxidare a co-dopanților în compus, prin rezonanță electronică de spin (RES) și prin spectroscopie de fotoelectroni cu radiații X (XPS).

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

Morfologia ceramicilor sinterizate a fost pusă în evidență, pe suprafețele neprelucrate, prin microscopie electronică de baleiaj (SEM), folosind microscopul electronic EVO 50 (CARL ZEISS, Inc., Thornwood, NY). Dimensiunea grăunților a scăzut de la 8-10 µm la 2-4 µm, la creșterea conținutului de Sb, iar forma lor paralelipipedică s-a modificat luând aspect de prisme triunghiulare, așa cum se vede în Fig.1 (a) și (b), care ilustrează morfologia ceramicilor cu 0.5, respectiv 3 mol% Sb.



Figura 1: Imagini SEM pe suprafața ceramicilor de PZT dopat cu (a) 0.005 mol Sb și (b) 0.03 mol Sb

Proprietățile feroelectrice ale materialelor studiate au fost evidențiate comparativ, pentru temperatura optimă de sinterizare, cu ajutorul curbelor de histerezis standard (*P*-*E*) și remanent (*P_{rem}*-*E*), ilustrate în figurile 2 (a)-(c).





Concluzii și perspective:

Obiectivul fazei a fost realizat în totalitate, pentru că s-a evidențiat caracterul hard al PZT, determinat de cei doi co-dopanți și modul în care valența și poziția acestora în rețea afectează caracteristicile structurale și electrice (fero-, piezo- și dielectrice) ale materialelor studiate.

Rezultatele obținute în cadrul fazei Nucleu au fost trimise pentru publicare, la J. Europ. Ceram. Soc.

Proiectul ar putea fi continuat prin realizarea unui studiu asemănător pe compoziții cu aceeași codopanți, în care stibiul să fie considerat că intră pe poziția plumbului, în formula chimică.

<u>Titlu Fază:</u> Studii experimentale privind relaxarea structurală a filmelor epitaxiale feroelectrice **Termen:** 15.05.2020

Objective:

Considerând serii de filme subțiri de PZT și BTO crescute epitaxial prin ablație laser pe monocristal de STO și STON având un strat buffer de SRO sau LSMO, se va efectua studiul structurii de domenii prin tehnici de difracție de raze X de înaltă rezoluție, completate cu imagini de microscopie de forță atomică, și de microscopie de forță piezo, cât și de microscopie electronică prin transmisie.

Rezultate estimate inițial:

Prin tehnicile de investigare propuse vor fi puse în evidență domeniile structurale apărute prin relaxarea filmelor epitaxiale și vor fi determinate cantitativ: unghiul de inclinare, lărgimea de coerență laterală a domeniilor, grosimea la care se declanșează relaxarea, constanțele de rețea in-plane și out-ofplane și evoluția acestora cu grosimea filmului.

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

Structurile considerate în acest studiu sunt: PZT/SRO/STO, PZT/STON, PZT/LSMO/STO și BTO/SRO/STO. Unde: STO = SrTiO3 – cubic, a=3.905 Å, este substratul monocristalin tăiat cu planul (001) paralel cu suprafața; STON este STO dopat cu Nb.. PZT semnifică aici PbZr_{0.20}Ti_{0.80} O₃ (prescurtat PZT-20-80)- teragonal cu a=3.954 Å și c=4.132 Å; SRO= SrRuO₃- pseudocubică a=3.910 Å, LSMO= La_{0.3}Sr_{0.7}MnO₃ pseudocubică cu a=7.801 Å; BTO= BaTiO₃ tetragonal, a=3.994 Å, c=4.038 Å.

Filmele au fost depuse prin ablație laser (pulsed laser deposition-PLD) pe substraturi monocristaline de STO sub formă de plachete dreptunghiulare de $5x10mm^2$, cu înălțimea de 1 mm. Înainte de depunere substraturile au fost atacate cu o soluție NH4-HF pentru a obține o suprafață terminată în TiO₂, după care au fost supuse unui tratament termic pentru a obține o structură de terase regulate cu trepte egale cu înălțimea unei celule elementare a STO (~4 Å) (Fig.1)



Figura 1: Imagini AFM ale substratului de STO. a) inițial; b) după atac chimic; c) după tratament termic [1]

Analiza XRD a pus în evidență faptul că plachetele de STO sunt astfel tăiate încât muchiile substratului sunt practic paralele cu muchiile celulei elementare ale STO. Dar planul de tăiere nu este perfect controlat de producător. În timp ce tăierea exactă paralel cu axele *a* și *b* nu influențează creșterea filmului pe suprafață, orientarea axei *c* este importantă. Orice monocristal are un miscut al suprafeței (τ) a cărui valoare și orientare în raport cu muchiile probei este în general necontrolată de producător. Valoarea și orientarea miscut-ului pot fi determinate prin XRD, sau, mai direct, prin vizualizarea structurii de terase prin AFM. Dacă lățimea teraselor este de 0.1 µm și înălțimea treptei este egală cu înălțimea unei celule elementare, 4 Å, valoarea miscut-ului este arctg (0.4/100)≈ 0.2°. Dacă lățimea teraselor este neuniformă pe suprafața substratului, nici înălțimea teraselor nu va fi aceeași (Fig. 3).



Figura 2: Înregistrări XRD obținute pentru proba CP69-PZT(200 nm)/SRO/STO; a) difractogramă (2θ-ω scan); b) RSM de domeniu unghiular mare; c), d) și e) detalii în jurul nodurilor -103 și 001. În c) d) și e) unitățile de măsură sunt în indici Miller fracționari ce corespund spațiului reciproc al STO. Intensitățile sunt peste tot în scala logaritmică.



Figura 3: a) Orientarea structurii perovschitice în raport cu muchiile substratului. b) unghiul de miscut și terasele; c) terase inegale.

Concluzii și perspective:

Obiectivele au fost realizate în ceea ce privește probele, analiza prin difractie de raze X de înaltă rezoluție, AFM, PFM și TEM și o mai bună înțelegere a relaxării filmelor epitaxiale.

Rezultatele vor fi date spre publicare, completate cu rezultate obținute deja pe un număr de alte probe similare, prezentate din punct de vedere statistic. Draftul va fi submis în a doua jumatate a anului la Journal of Crystal Growth, Journal of Applied Physics sau PR Materials.

Studiile ar merita să fie continuate în ceea ce privește influența structurii de terase a substratului asupra structurii de domenii, în mod special a relaxării domeniilor total adaptate din vecinătatea

interfeței cu substratul. Așteptarea este să stabilim o conexiune cauza-efect pe baza acumulării de date statistice.

<u>Titlu Fază:</u> Investigarea relației microstructură - proprietăți în materialele feroelectrice Termen: 15.06.2020

Objective:

Obiectivul fazei, respectiv manipularea proprietăților straturilor subțiri feroelectrice prin intermediul orientării cristaline/ distribuției de domenii, se încadrează în obiectivul general al proiectului prin desfășurarea de cercetări experimentale în domeniul fizicii stării condensate, cu accent pe sisteme nano-dimensionale și suprafețe cu potențial de aplicații în domenii de înaltă tehnologie.

Rezultate estimate inițial:

Pentru atingerea obiectivului fazei s-au avut în vedere următoarele:

- Creșterea straturilor subțiri feroelectrice texturate/heteroepitaxiale prin metoda fizică de depunere din faza de vapori și investigarea proprietăților morfo-structurale prin difracția de raze X și microscopie de forță atomică (AFM).

- Investigarea proprietăților feroelectrice la scară nanometrică prin microscopia de forță atomică cu răspuns piezoelectric (PFM).

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

Straturile subțiri de SRO și Ir crescute pe substrat de STO și respectiv MgO au fost caracterizate din punct de vedere morfologic si structural prin microscopie de forță atomică, difracție de raze X și microscopie prin transmisie de electroni (TEM). Înainte de depunerea straturilor de SRO sau Ir, substraturile au fost tratate chimic și termic cu scopul de a obține suprafețe cu cât mai puține defecte și cu o distribuție uniformă a teraselor. În figura 1 sunt prezentate rezultatele reprezentative obținute în urma investigațiilor AFM pe straturile de SRO cu grosimea de 20 nm și Ir cu grosimea de 70 nm crescute pe substraturi STO-(001), -(111) și respectiv MgO-(001), -(110), -(111).



Figura 1: Imagini AFM obținute pe straturi subțiri de SRO și Ir crescute pe a) STO(001) și b) STO(111) și respectiv c) MgO(001), d) MgO(110) și e) MgO(111)

În cazul simetriei tetragonale, în absența câmpului electric, pentru a minimiza stresul din material se formează domenii feroelectrice cu polarizările orientate pe direcțiile [100] și [001]. Se vor forma astfel domenii, perpendiculare între ele, cu direcții ale polarizării orientate la 0°, 90°, 180° și la 270° față de oricare din cele două direcții menționate. Așa cum se observă în imaginea fazei răspunsului piezoelectric măsurat perpendicular pe suprafața probei - Out Off Plane (OOP) - (figura 2b) obținută pe probe de PZT(001), polarizarea a fost inversată atunci când pe cantilever a fost aplicată tensiune pozitivă conform cu harta de polare inserată în figura 2a. Acest lucru indică faptul că domeniile feroelectrice (după creșterea stratului de PZT și răcirea acestuia în atmosferă controlată) sunt orientate dinspre substrat spre suprafața probei. În cazul straturilor subțiri de PZT(111) structura de domenii observată, în cea mai mare parte, este rezultatul formării de structuri de nanodomenii feroelectrice la 90° de tipul (a_1 , a_2)/(a_1 , c), și (a_2 , c) și (a_1 , c)/(a_2 , c) cu lățimea de aproximativ 200 nm, orientate pe direcții ce formează între ele unghiuri de 120° (zone notate cu "1" și "2" în figura 2d).





Au fost crescute hetero-epitaxial straturi subțiri cu rol de electrod inferior din SRO și Ir pe substraturi de STO și respectiv MgO. Relația microstructură-proprietăți în structuri hetero-epitaxiale pe bază de materiale feroelectrice a fost investigată prin XRD, AFM, TEM și PFM. A fost pus în evidență faptul că manipularea distribuției spațiale a domeniilor feroelectrice poate fi realizată prin creșterea hetero-epitaxială a straturilor subțiri feroelectrice având orientări cristaline diferite. Astfel se poate controla structura de domenii și densitatea pereților de domenii și implicit caracteristicile viitoarelor dispozitive bazate pe astfel de materiale.

Obiectivul de cercetare propus pentru această fază a fost îndeplinit integral și reprezintă o etapă preliminară în procesul de integrare a straturilor subțiri PZT cu tehnologia circuitelor integrate în vederea obținerii de dispozitive bazate pe straturi subțiri feroelectrice cu proprietăți îmbunătățite.

Având în vedere rezultatele obținute, precum și complexitatea proceselor și fenomenelor investigate la scară nanometrică se impune continuarea cercetărilor pe această temă prin coroborarea cu rezultatele investigațiilor la scară macrometrică.

O parte din rezultatele obținute au fost subiectul lucrarii "*Texture and interface characterization* of iridium thin films grown on MgO substrates with different orientations", publicată în Journal of Materials Science, February 2020, Volume 55, Issue 4, pp 1753–1764.

<u>Titlu Fază:</u> Originea și proprietățile stărilor de margine chirale și nechirale în sisteme bidimensionale complexe

Termen: 15.07.2020

Objective:

Calculul stărilor de margine în grafenă finită și efecte asupra conductanței electrice.

Rezultate estimate inițial:

Calculul stărilor de margine zig-zag în grafene rectangulare.

Studiul propietăților de transport și interferența cuantică distructivă în spațiul energetic la mijlocul spectrului (E=0) pentru grafene și sisteme bidimensionale legate în serie.

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

Stări de margine în grafenă. Considerăm o grafenă regtangulară și calculăm stările de margine după metoda descrisă în [1]. Dimensiunile grafenei folosite sunt Nzz=5 (numărul de puncte în direcția zig-zag) și Nac=5 (numărul de hexagoane în direcția arm-chair). Stările proprii sunt indexate de doi indici cuantici, ξ_i și δ_j . Numărul cuantic $\xi_i=\pi^*i/(Nzz+1)$ depinde de numărul de puncte zig-zag și valoarea lui este aleasă astfel încât funcția de undă în direcția zig-zag să se anuleze la capete (sin(ξ_i^*i)=0 pentru i=0 si i=Nzz+1). Numărul cuantic δ_j satisface o ecuație caracteristică [1] :

 $\sinh(\delta j * \operatorname{Nac}) = 2 \cos(\xi j/2) \sinh\left[\delta j \left(\operatorname{Nac} + \frac{1}{2}\right)\right]$

Obținem o singură pereche de stări de margine pentru $\xi 5=5\pi/6$ având $\delta 5=1.317$. Cele două energii obținute respectă simetria chirală a sistemului având Ezz+=-Ezz-. Acestea sunt date de formula [1]:

 $Ezz \pm = \frac{\sinh(\delta 5/2)}{\sinh[\delta 5(\operatorname{Nac} + 1/2)]}.$

Cele două valori obținue sunt $Ezz \pm = \pm 0.01t$ unde t este 2.7 eV pentru nanografenă.

Proprietăți de transport. În continuare calculăm proprietățile de transport. Cu ajutorul formulei Landauer-Büttiker, atașând sistemului finit două fire în 2 puncte arm-chair. Dacă fiecare punct al grafenei este indexat de coordonatele (n,m), n în direcția zig-zag și m în direcția arm chair, alegem primul fir atașat în punctul (1,8) și al doilea fir atașat în punctul (11,3). Sistemul fizic este reprezentat în Figura 1.


Figura 1: Grafenă rectanugulară și punctele de contact ale celor două fire de transport.

Transmitanța electrică T va fi egală cu pătratul amplitudinii de tunelare t și acumularea de faza a funcției de împrăștiere este Φ =arg t. Valoarile obținute numeric pentru funcțiile T(E) și Φ (E) sunt date în Figura 2.



Figura 2. Zeroul transmitanței și faza funcției de undă în grafena finită la E=0.

Cele două maxime T(E)=1 ale transmitanței se obțin la cele două energii de rezonanță aproximativ egale cu valorile stărilor zig-zag calculate mai sus, $Ezz \pm = \pm 0.001t$. Între cele două rezonanțe se observă

existența unui zero absolut T(E)=0 la E=0, indiferent de valoarea constantei de cuplaj a firelor. Spre deosebire de zeroul de tip Fano pentru care căderea de fază este $\Delta \Phi=\pi$, în cazul zeroului obținut în Figura 2 observăm că nu avem acest rezultat, obținând $\Delta \Phi=0$. În jurul celor două rezonanțe evoluția fazei este $\Delta \Phi=\pi$ așa cum era de așteptat.

În lucrarea publicată aferentă prezentei faze, zeroul obținut este explicat în termenii interferențelor cuantice distructive de tipul TAB în sisteme bipartite.

Concluzii și perspective:

Obiectivul fazei a fost îndeplinit. Rezultatele obținute sunt continue în lucrarea **"Robust conductance zeroes in graphene quantum dots and other bipartite systems"** publicată în Phys. Rev. B 101, 235318 (2020).

<u>Titlu Fază:</u> Atenuatoare și defazoare cu materiale dielectrice pentru unde milimetrice și THz **Termen:** 14.08.2020

Objective:

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 de THz în domeniu temporal.

Rezultate estimate inițial:

a) Investigarea prin calcul electromagnetic a răspunsului în unde milimetrice și THz pentru diferite structuri de interes;

b) Realizarea de geometrii noi de dispozitive cu atenuare și defazaj controlabil pentru THz și unde milimetrice;

c) Caracterizarea în unde milimetrice și THz a geometriilor propuse.

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

În această etapă au fost investigate structuri 2-D cu 3 tipuri de rezonatori metalici planari și anume: (1) rezonatorul buclă hexagonală închisă, (2) rezonatorul "ac de par" în formă de U cunoscut și sub numele de Split Ring Resonator (SRR) și (3) un rezonator nou numit "dublu F". Primul și al treilea rezonator sunt din Cu depus pe un substrat de Si de înaltă rezistivitate cu dimensiunile 10 mm x 10mm x 0,5 mm, în timp ce al doilea este din Au depus pe un substrat de GaAs cu dimensiuni de 10 mm x 10mm x 0,3 mm. În toate cazurile, substratul care susține metasuprafața este transparet în gama de frecvențe investigată. În cazul structurilor (2) și (3) dimensiunea celulei este în jur de o zecime din lungimea de undă de interes și aceste structuri pot fi considerate metamateriale planare (metasuprafețe). Pentru structura (1) raportul lungime de undă la atenuare maximă / dimensiunea celulei este de 4.8 și de aceea vom trata această structură nu ca o metasuprafață ci ca o suprafață selectivă în frecvențe (FSS).

Geometria structurii este arătată în Fig. 1. Parametrii geometrici considerați au fost: a - perioada spațială de-a lungul axei Ox, b - perioada spațială de-a lungul axei Oy, c = 0.5 mm grosimea substratului, H = 1 mm grosimea stratului de aer de deasupra de sub structura folosită în simulări, w lățimea liniei metalice a hexagonului, R_{hex} este jumătate din diagonal hexagonului exterior (raza cercului circumscris structurii).



Figura 1: (a) Structură periodică cu rezonatori hexagonali. (b) Celula elementara cu rezonatorul hexagonal – densitatea curentului de suprafață la 0,21 THz care corespunde unui maxim de transmisie (a=0,22 mm si b=0.25 mm)

Obiectivele prevăzute pentru această fază au fost indeplinite integral :

a) Au fost efectuate investigații prin calcul electromagnetic a răspunsului în unde milimetrice / THz pentru structuri planare de interes bazate pe trei tipuri diferite de rezonatori (buclă hexagonală, Split Ring Resonator, rezonator dublu F);

b) Au fost propuse geometrii noi de dispozitive planare care prezintă atenuare și defazaj controlabil prin parametrii geometriei rezonatorilor;

c) Caracterizarea răspunsului electromagnetic în unde milimetrice și THz a fost făcută pentru unele structuri prin spectrometrie de THz în domeniu temporal;

d) O parte din rezultate au fost raportate în articole ISI [7, 9] și prezentate la o conferință ISI [6].

Rezultatele investigațiilor efectuate permit dezvoltarea de materiale artificiale 2-D folosind elemente de tip varactori feroelectrici (BST) sau comutatori pe bază de materiale cu schimbare de fază (VO₂) pentru controlul agil al răspunsului electromagnetic cu stimuli externi.

<u>Titlu Fază:</u> Cercetări experimentale privind prepararea și caracterizarea unor nanostructure compozite multifuncționale-piezoelectrice/feroelectrice cu arhitectură de tip core-shell

Termen: 14.08.2020

Objective:

În cadrul acestei faze de NUCLEU, se propune prepararea și caracterizarea unor compozite coreshell formate din BNT-BT0.08 și CoFe2O4, în proporții masice variabile. Aceste compozite combină proprietățile piezoelectrice ale BNT-BT0.08 cu proprietățile magnetice ale CoFe2O4. Metoda de sinteză care va fi folosită pentru prepararea celor două faze va fi metoda sol-gel, recunoscută pentru capacitatea ei de a permite obținerea nanomaterialelor.

Materialele compozite care vor fi obținute vor fi caracterizate din punct de vedere structural, morfologic, feroelectric si feromagnetic în vederea testării multifuncționalității lor. Aplicațiile acestor compozite sunt numeroase: condensatoare, senzori piezoelectrici, dispozitive magnetoelectronice, dispozitive spintronice, nanogeneratorul piezoelectric pe baza nanofirelor de BNT și CoFe2O4, senzori de câmp magnetic, etc.

Rezultate estimate inițial:

Prepararea unor materiale ceramice compozite, cu componentele BNT-BT0.08 și CoFe2O4 în proporții variabile, cu structură de tip core-shell, prin metoda sol-gel. Investigarea proprietăților dielectrice, magnetice și magnetoelectrice ale acestor compozite ceramice în scopul obținerii unor materiale multifuncționale piezoelectrice/feromagnetice.

Se va face o corelație între morfologia și structura fazelor cristaline componente ale ceramicilor compozit și proprietățile lor dielectrice, magnetice și magnetoelectrice în funcție de raportul molar al celor două faze componente.

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

Au fost preparate nanostructuri compozit multifuncționale piezoelectrice/feroelectrice, cu arhitectură de tip core-shell, din BNT-BT0.08 (miezul piezoelectric) și CoFe2O4 (invelișul exterior feromagnetic), folosind metoda sol-gel clasicș pentru BNT-BT0.08 și metoda sol-gel cu auto-combustie pentru CoFe2O4. Am ales structura core-shell pentru particulele pulberilor compozit deoarece prin această arhitectură se asociază două materiale cu proprietăți diferite într-o singură nanostructură.

Astfel, se realizează performanțe avansate și multifuncționalitate pentru materialul compozit datorită prezenței unei suprafețe mari la interfața dintre core și shell care îmbunătățește cuplarea între proprietățile feromagnetice și feroelectrice. Compozitele preparate și analizate au avut urmatoarele compozitii: proba **S1** cu raportul molar BNTBT0.08/CoFe2O4=1:0.5 (compoziție de masă 35.71% CoFe2O4 și 64.49% BNT-BT0.08), proba **S2** cu raportul molar BNT-BT0.08/CoFe2O4=1:1 (compoziție de masă 52.41 % CoFe2O4 și 47.59 % BNT-BT0.08) și proba **S3** cu raportul molar BNTBT0.08/CoFe2O4=1:1.5 (compoziție de masă 68.77% CoFe2O4 și 31.23% BNT-BT0.08). Pulberile core-shell de BNT-BT0.08/CoFe2O4 (probele S1-S3) au fost prin calcinare la 700 °C, 1 h în aer. Pastilele de BNT-BT0.08/CoFe2O4 obținute prin presare uniaxială au fost sinterizate la 1100 °C timp de 15 min, în aer.





Imagini TEM, HR-TEM și SAED pentru probele preparate.

Au fost preparate și caracterizate nanostructuri compozit piezoelectrice/feromagnetice BNT-BT0.08/CoFe2O4, cu arhitectură de tip core-shell, având următoatele compoziții: proba S1 cu raportul molar BNT-BT0.08/CoFe2O4=1:0.5, proba S2 cu raportul molar BNTBT0.08/CoFe2O4=1:1 și proba S3 cu raportul molar BNT-BT0.08/CoFe2O4=1:1.5.

Analizele prin DRX, SEM, TEM și XPS au arătat că toate aceste compozite au compoziția de faze dorită și structură de tip core-shell arătând că procedura experimentală folosită poate fi considerată o tehnologie de laborator utilă și pentru prepararea altor compozite cu configurație core-shell.

Măsurătorile dielectrice, magnetice și magnetoelectrice ale acestor compozite au arătat o influență mare atât a raportului fazelor piezoelectrică și feromagnetică cât și a structurii compozitelor asupra acestor proprietăți.

Pentru continuarea proiectului, este utilă investigarea compozitelor core-shell la care învelișul exterior să fie din BNT-BT0.08. Această structură prezintă posibilitatea de îmbunătățire a polării compozitului și astfel efectuarea mai ușoară a măsurătorilor magnetoelectrice.

Rezultatele științifice obținute în cadrul acestei faze de NUCLEU sunt incluse în articolul: M. Cernea, R. Radu, H. Amorín, S. G. Greculeasa, B. Ş. Vasile, V. A. Surdu, P. Ganea, R. Trușcă, M. Hattab, C. Galassi, "Lead-Free BNT-BT0.08/CoFe2O4 Core-Shell Nanostructures with Potential Multifunctional Applications", Nanomaterials, 10 (2020) 672-690.

Prin rezultatele obținute, această fază de proiect contribuie la eforturile focalizate pe sinteza unor nanostructuri multiferoice mai complexe și pe măsurători de cuplare magnetoelectrică, care vor duce la o înțelegere mai aprofundată a naturii interacțiunilor electromagnetice și la aplicații în domeniul senzorilor și al tehnologiilor de procesare a semnalelor.

<u>Titlu Fază:</u> Magneți durificați prin cuplaj de schimb bazați pe oxizi de fier

Termen: 15.09.2020

Objective:

1. Fabricarea unui compozit format din hexaferită de Sr (magnetism hard) și din ferite spinelice (magnetism soft).

2. Efectuarea de măsurători de structură și măsurători magnetice, pentru evidențierea calității compozitului și a prezenței cuplajului de schimb.

Rezultate estimate inițial:

1. Determinarea structurii locale și înconjurării specifice în sistemele de oxizi de Fe (identificarea diferitelor contribuții ale ionilor de Fe și a așezării cationice prin spectroscopie Mössbauer).

2. Evidențierea cuplajului de schimb prin măsurători magnetice.

3. Obținerea unui produs energetic maxim adecvat aplicațiilor precum magneți permanenți, înregistrare magnetică și absorbția de microunde.

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

Hexaferita de stronțiu comercială a fost achiziționată de la Sigma Aldrich (dimensiunea nanoparticulelor < 100 nm). Magnetita a fost preparată prin metoda precipitării, utilizând precursorii FeCl2 și FeCl3, surfactantul acidul oleic și agentul de precipitare NH4OH 30% (aq). Amestecul inițial de reactivi a fost introdus într-un vas, sub flux continuu de azot. Temperatura a fost menținută la temperatura camerei, iar după omogenizarea completă a celor două cloruri, surfactantul și baza au fost adăugate rapid sub amestec energic. Amestecul a continuat timp de două ore, după care acoperirea de silicon a fost înlăturată și amestecul de reactivi a fost expus la aer. Nanoparticulele au fost decantate folosind un magnet permanent și au fost spălate ulterior de două ori în H2O-EtOH, separate pe un magnet și uscate la 80 °C peste noapte. Pulberea rezultantă a fost menținută într-un GloveBox de tip M-Braun pentru caracterizări ulterioare. Hexaferita de stronțiu (90 mg) și magnetita (10 mg) au fost amestecate cu câteva picături de EtOH și sonicate timp de o oră. După sonicare, solventul a fost înlăturat sub vid la temperatura camerei.

În figura de mai jos sunt prezentate difracțiile de raze X ale probelor Fe3O4 și SrFe12O19, precum și ale compozitului. În figurile de difracție ale hexaferitei și magnetitei sunt evidențiate fazele unice hexagonală de magnetoplumbit SrFe12O19 (fișierele JCPDS 33-1340 și 84-1531), precum și faza de ferită spinelică Fe3O4 (fișierul JCPDS 65-3107) prin intermediul programului MAUD. Maximele largi din figura de difracție a magnetitei sunt atribuite particulelor de dimensiuni reduse. În cazul compozitului, maximele sunt asemănătoare fazei SrFe12O19, datorită contribuției predominante în compozit. Maximele magnetitei nu sunt mai intense decât acelea ale hexaferitei (cu excepția unor maxime largi de intensitate redusă, (311) și (440)), datorită contribuției largi (rafinare Rietveld, MaudTM).



Curbe de histerezis magnetic pentru probele preparate.

Concluzii și perspective:

În cadrul prezentei faze a fost preparat un compozit format din hexaferită de Sr și magnetită. Structura compozitului a fost probată prin difracție de raze X, confirmându-se prezența fazelor implicate. A fost determinată structura locală prin spectroscopie Mössbauer și au fost evidențiate pozițiile diferite ale fierului în cele două componente din compozit, precum și raportul de faze. Din măsurătorile magnetice a fost observată prezența cuplajului de schimb și a fost determinat produsul energetic maxim al compozitului. Rezultatele prezentate sunt în pregătire pentru trimiterea în perioada

următoare a unui articol științific cu titlul **"Magnetoplumbite Sr ferrite and magnetite nanocomposites"** la revista *International Journal of Materials Research*.

<u>Titlu Fază:</u> Compozite metalo ceramice stabile termochimic pentru aplicații la temperaturi înalte **Termen:** 15.09.2020

Objective:

Obținerea și caracterizarea unor noi materiale compozite cu proprietăți îmbunătățite pentru aplicații la temperaturi înalte. Determinarea și realizarea unor noi funcționalități pentru compozite metalo-ceramice avansate.

Rezultate estimate inițial:

Propunerea și testarea unor concepte, metode și tehnologii de realizare a materialelor compozite metalo-ceramice și multimetal în vederea îmbunătățirii proprietăților termo-fizice de temparatură înaltă ale acestora. Investigarea posibilităților de ajustare a proprietăților materialelor realizate, evaluarea acestor proprietăți prin măsurători ale proprietăților termice și caracterizare microstructurală.

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

W cu dispersii de SiC, ZrC, B. Din start trebuie precizat că toate dispersiile (concentrație scăzută de ceramică) care au fost utilizate au temperaturi de topire inferioare celei corespunzătoare W. Aceste elemente ar trebui să-și păstreze granulația inițială, având rolul principal de a consolida matricea de W. Pe de altă parte nu trebuie neglijat faptul că în condițiile speciale din SPS este posibilă o reacție între materiale. În cazul compozitelor cu SiC, temperatura utilizată este suficientă pentru a forma cărburi și siliciuri de W. Acestea nu ar trebui să afecteze rolul de consolidare al dispersiilor nanometrice în măsura în care rămân localizate în zonele de graniță între graunții micrometrici de W. Pentru concentrații mici volumetrice de SiC (1-3%) dispersiile sunt localizate la granițele de graunți așa cum se poate observa și în figura 1, împiedicând pe de o parte creșterea grăunților de W în cazul expunerii la temperaturi înalte a materialului și pe de altă parte îmbunătățind comportarea W la fractură. Spre deosebire de alte materiale cu structură cubică cu volum centrat (bcc), microstructură W (forma și mărimea grăunților acestuia, textura) au un rol major în mecanismul său de fracturare care este determinată de coeziunea scăzută la granițele dintre grăunți cu unghiuri mari între fațete.



Figura 1 : Imagine SEM de electroni secundari pentru proba cu W cu 2% SiC. Săgețile indică poziția dispersiilor la granițe de grăunți.

Compozite metal-metal refractare: W-Re, W-Ir

Un alt tip de materiale abordate sunt compozitele cu matrice de W și dispersii metalice. Metalele selectate trebuie să aibă proprietăți similare cu cel de matrice și în acest sens au fost selectate Re și Ir.

Deși Re este un element care se aliază cu W, sinterizarea pulberilor conduce la materiale cu densitate scazută și cu granițe de grăunți care prezintă semne de aliere la interfață.



Figura 2 : Imagine SEM de electroni retroîmprăștiați pentru proba cu W cu 10% Ir.

Compozite metal-metal cu posibilitate de aliere parțială: W-Cr

În figura 3 este prezentată o imagine SEM obținută cu electroni retroîmprăștiați pentru compozitul din W cu 10% Cr. Se poate observa imediat că W și Cr au reacționat în timpul procesării, prezența zonelor gri fiind asociată cu formarea unei faze W-Cr bogate în Cr. Pe măsură ce concentrația de Cr crește, reacția W-Cr generează atât faza bogată în Cr cât și o fază bogată în W. Acest lucru este explicabil prin prisma diagramei de faze W Cr care conține o multitudine de soluții solide care se separă în cele două tipuri de faze. În același timp Cr care nu intră în contact cu W formează insule care pot fi observate ca zone închise la culoare în imagini. Dacă cantitatea de Cr este mare, în timpul procesării apar o multitudine de faze cu o distribuție aleatoare.



Figura 3 : Imagine SEM de electroni retroîmprăștiați pentru proba cu W cu 10% Cr

Concluzii și perspective:

În cadrul studiului de față au fost propuse și testate mai multe concepte de realizare a materialelor compozite metalo-ceramice și multimetal în vederea îmbunătățirii proprietăților termo-fizice de temparatură înaltă ale acestora. Problemele abordate sunt legate de reducerea efectelor fenomenului de recristalizare în cazul expunerii prelungite la temperaturi înalte, creșterea plasticității materialelor casante pentru îmbunătățirea comportării la șocuri termice și controlul proprietăților de transport termic prin modificarea compoziției materialului.

Au fost astfel evaluate posibilitățile de realizare a unor materiale noi utilizând tehnologia de sinterizare asistată de câmp electric disponibilă în cadrul INCDFM implicând:

- > realizare de compozite metal ceramică refractare;
- > realizarea de materiale compozite metal-metal refractare;
- > realizarea de matrici metalice prin aliere directă în cadrul procesului de sinterizare;

realizarea de compozite capabile să opereze la temperaturi înalte având și componente metalice în fază lichidă.

Realizarea unor astfel de compozite printr-o metodă rapidă și scalabilă la nivel industrial poate conduce la dezvoltarea unor aplicații cu impact puternic în special în domeniul energetic.

<u>Titlu Fază:</u> Studiul proprietăților duale, hipertermice și fotocatalitice, ale unor sisteme nanocompozite de tip metal-/oxid magnetic-TiO2 cu potențial aplicativ în terapii antitumorale combinate

Termen: 15.10.2020

Objective:

Sinteza unor materiale nanocompozite citocompatibile de tip oxid de fier-TiO₂ cu proprietăți combinate, magnetice (încălzire în câmp magnetic alternativ) și fotocatalitice (generare de specii reactive de oxigen (ROS) sub acțiunea radiației UV), și caracterizarea particularităților structurale și funcționale ale acestora.

Rezultate estimate inițial:

a) Sinteza a trei tipuri de materiale nanocompozite Fe_3O_4/γ - Fe_2O_3 – TiO₂, pornind de la nanoparticule de oxid de fier cu proprietăți morfo-structurale și magnetice diferite;

b) Caracterizarea proprietăților morfo-structurale ale materialelor obținute;

c) Determinarea ratelor de absorbție specifică ("specific absorption rate" (SAR)) ale nanocompozitelor sintetizate, prin analiza curbelor de încălzire în câmp magnetic alternativ înregistrate pentru acestea;

d) Determinarea constantelor de reacție pentru fotogenerarea de ROS de către nanocompozitele sintetizate expuse la radiație UV de energie joasă (365 nm);

e) Determinarea citotoxicității materialelor studiate.

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

Cantități egale din trei tipuri de nanoparticule magnetice cu proprietăți morfo-structurale și magnetice diferite au fost dispersate și ultrasonicate în butoxid de titan (C₁₆H₃₆O₄Ti, TBT) la concentrațiile 50, 20 și 1 mg/ml. TBT a fost apoi hidrolizat folosind apă atmosferică sau apă distilată adaugată în exces peste suspensia de nanoparticule de oxid de fier. Apa nereacționată a fost aruncată și precipitatul produs a fost uscat la 80 °C și expus la tratament termic la temperatura în intervalul 200-600 °C, timp de o oră, în aer atmosferic.

Morfologia și distribuțiile de dimensiuni ale nanoparticulelor de oxid de fier magnetic folosite pentru sinteza nanocompozitelor studiate sunt prezentate în Fig.1. Compoziția de fază a acestora a fost determinată prin XRD și spectroscopie Mössbauer astfel : SIAL (76% Fe₃O₄, 24% γ -Fe₂O₃), PP (77% Fe₃O₄, 23% γ -Fe₂O₃) and COPP (71% Fe₃O₄, 29% γ -Fe₂O₃).



Figura 1 : Imagini CTEM ale nanoparticulelor de oxid de fier (a-c) ; distribuțiile de dimensiuni ale acestora (d)

Eficiența reacției de fotogenerare de ROS sub iradiere UV (365 nm) a fost determinată prin rezonanță electronică de spin (RES) în prezența compusului 5,5-Dimethyl-1-Pyrroline-N-Oxide (DMPO). Acesta are rol de "spin-trap", fiind folosit pentru a captura radicalii de oxigen (denumiți generic •R) cu timp de viață foarte scurt, formați prin fotoexcitarea TiO₂. DMPO formează aducți relativ stabili cu acești radicali (•DMPO–R) conform reacției DMPO + •R \rightarrow •DMPO–R, menținându-i disponibili pentru determinările RES.

Fig.2(a) prezintă spectrul EPR al fazei unice TiO₂, sintetizată urmând identic protocolul folosit pentru nanocompozite dar în absența nanoparticulelor de oxid de fier, împreună cu cinetica fotogenerării de ROS asociată. Rezultatele obținute pentru materialele compozite sunt ilustrate în Fig.2 (b-d).



*Figura 5 : Cinetica fotogenerării ROS (UV 365 nm) pentru: (a) TiO*₂-400 (*detaliu spectrul EPR*), (b) NC-SIAL-400, (c) NC-PP-400, (d) NC-COPP-400

Au fost sintetizate materiale nanocompozite de tip oxid de fier-TiO2 și proprietățile acestora, morfo-structurale, hipertermice, fotogenerare de ROS și citocompatibilitate, au fost investigate. Rezultatele au condus la constrângeri asupra condițiilor de sinteză și la identificarea unei probe (NC-PP-400) care prezintă proprietăți funcționale superioare și citocompatibilitate bună, fiind un posibil candidat pentru aplicații terapeutice antitumorale.

Rezultate principale :

a) Sinteza de materiale nanocompozite de tip oxid de fier-TiO₂ pornind de la trei feluri de nanoparticule de oxid de fier (amestec Fe_3O_4/γ - Fe_2O_3) cu proprietăți morfostructurale și magnetice diferite;

b) Caracterizarea proprietăților structurale (XRD, spectroscopie Mössbauer) și a distribuției microscopice a fazelor (TEM) în compozitele obținute;

c) Determinarea valorilor SAR pentru încălzirea în câmp magnetic alternativ în cazul probelor convenabile din punct de vedere structural (concentrație minimă de hematită (α -Fe₂O₃) în faza de oxid de fier și dimensiune minimă de particulă în faza de TiO₂) (identificarea probei cu activitate maximă);

d) Determinarea variației SAR cu intensitatea câmpului magnetic aplicat;

e) Determinarea constantelor de reacție din cinetica reacției de fotogenerare de ROS (identificarea probei cu activitate maximă);

f) Determinarea citotoxicității nanocompozitelor cu proprietăți funcționale (hipertermice și generare de ROS) superioare.

Obiectivele fazei au fost realizate integral, rezultatele obținute corespunzând celor preconizate.

Studiul poate fi continuat în vederea optimizării condițiilor de sinteză pentru obținerea de nanocompozite cu structură microscopică și dimensiune controlate și pentru caracterizarea proceselor desfășurate la interfața fazelor nanocompozitului și înțelegerea modului în care aceste procese influențează proprietățile funcționale ale acestuia.

Lucrări publicate sau acceptate:

Influence of Surfactant-Tailored Mn-doped ZnO Nanoparticles on ROS Production and DNA Damage Induced in Murine Fibroblast Cells, T. Popescu, C. O. Matei, I. D. Vlaicu, I. Tivig, A. C. Kuncser, M. Ștefan, D. Ghica, L. C. Miclea, T. Savopol, D. C. Culita, M. G. Moisescu (acceptat pentru publicare la Scientific Reports (<u>https://www.nature.com/srep/</u>)

Lucrari trimise pentru publicare:

Iron oxide-TiO₂ nanocomposites with magnetic and photocatalytic properties suitable for antitumor and water treatment applications, T. Popescu, V. A. Mărăloiu, A. M. Rostaș, L. Diamandescu, N. Iacob, A. R. Lupu, M. C. Ilas, M. Feder, I. D. Vlaicu (lucrare trimisa pentru publicare la Powder Technology (I.F. 4.142) (<u>https://www.journals.elsevier.com/powder-technology</u>)

<u>Titlu Fază:</u> Sisteme magnetice low-cost fără pământuri rare, cu proprietăți similare fazelor tetragonale L10

Termen: 15.10.2020

Objective:

Realizarea prin metode de sinteză de neechilibru a unor noi clase de magneți permanenți fără pământuri rare și caracterizarea avansată a acestora din punct de vedere structural și magnetic.

Rezultate estimate inițial:

În scopul creării de magneți nanocompoziți cuplați prin schimb, care să aibă temperaturi Curie ridicate, să fie stabili la corozie și pentru a se elimina necesarul de pământuri rare, elemente ce sunt contaminante pentru mediul înconjurător, s-au căutat soluții alternative pentru aceste tipuri de magneți. O soluție este utilizarea aliajului FePt. Aliajul echiatomic FePt prezintă o transformare structurală de fază de tip dezordine-ordine, de la faza dezordonată de tip cub cu fețe centrate A1 la faza ordonată de tip tetragonal cu fețe centrate. Acest tip de aliaj este de interes pentru că prezintă caracteristici magnetice specifice magneților permanenți. Faza ordonată FePt $L1_0$, de simetrie tetragonală, prezintă anizotropie magnetocristalină înaltă (K=7MJm⁻³) fiind un foarte bun magnet permanent. Compoziția chimică a fost aleasă astfel încât să se obțină, după tratamente termice adecvate, o structură de fază care să permită formarea unui magnet nanocompozit cuplat prin schimb. Ideea este de a se încerca să se sintetizeze un compus nanocristalin sau amorf, din care prin tratamente adecvate, să se obțină nanogranule magnetice hard $L1_0$ aflate într-o matrice magnetică moale A1 sau $L1_2$.

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

S-au realizat două compoziții în jurul valorii echiatomice 50:50, și anume Fe₅₃Pt₄₇ și Fe₅₅Pt₄₅, prin măcinare în moara cu bile (mecanosinteză) urmată de efectuarea de tratamente termice adecvate, în flux de argon. Măcinarea s-a făcut în mediu umed de hexan, valurile conținând pulberile și sferele de inox fiind sigilate pentru asigurarea integrității mediului de măcinare în decursul măcinării. S-au efectuat cicluri de măcinare de câte 10 min urmate de 3 min de repaus. A rezultat un timp total efectiv de

măcinare de 8 ore, în condițiile în care frecvența de rotație aleasă a fost de 350 rpm. Probele obținute prin metoda de neechilibru a mecanosintezei au fost caracterizate printr-o gamă largă de tehnici experimentale pentru decelarea caracteristicilor sale structurale și magnetice. Caracterizarea structurală a probei a fost realizata prin difracție de raze X cu ajutorul unui dispozitiv difractometru Bruker Advance D8 folosindu-se radiația Cu K α de 1.54 Å. Pentru cele două probe în stare as-cast se poate observa faptul că picurile sunt largi, ceea ce indică lipsa ordonării la lungă distanță iar liniile Bragg existente sunt atribuite fazei cubice A1, dezordonate. Probele de pulberi tratate izoterm la 400 și respectiv 500C, prezintă o structură bifazică. Aici atât faza cubică fcc FePt cât și cea tetragonala L10 FePt sunt obținute. Analiza full profile de tip Rietveld (Fig. 1) a permis obținerea parametrilor de rețea precum și a dimensiunii medii de granulă. Valorile sunt prezentate în Tabelul 1.



Figura 1: Analiza full-profile a difractogramei probei Fe53Pt47 tratată la 400 °C. Coexistența celor două faze este probată prin fitul prezentat

Proba	Faza	Pa	rametri (Å)		Diametru mediu (nm)	Abundenta (%)
Fe53Pt47—as-milled	fcc FePt	а	= 3.8037 0.0002	±	D=22 ± 3	100
		а	= 3.7972 0.0002	±		
Fe53Pt47-tratat	<i>fcc</i> FePt	a	= 3.8383	±	$D=25 \pm 4$	27.2
400°C	L10 FePt		0.0001		$D=38 \pm 7$	72.8
		С	= 3.7228	±		
			0.0016			
FaceDtic as milled	fee FoDt	a	= 3.8045	±	D - 27 + 2	100
1°C551°145—as-iiiiicu			0.0004		$D=21\pm 2$	100
		a	= 3.7925	±		
			0.0003			
Fe55Pt45-tratat	fcc FePt	а	= 3.8249	\pm	$D=32\pm 3$	21.3
400°C	L10 FePt		0.0004		$D=49 \pm 5$	78.7
		С	= 3.7116	±		
			0.0013			

Tabel 1: Parametrii de rețea, abundența de fază și diametrul mediu de granulă obținute din analiză full-profile.



Figura 2: Magnetizare inițială și ciclul de histerezis al probei Fe₅₅Pt₄₅ tratată la 400°C.

Rezultatele obținute constau în crearea și caracterizarea unui număr de 4 produse, materiale magnetice caracterizate structural și magnetic. Se estimează că gradul de îndeplinire a obiectivelor este de 100%. Drept indicatori de rezultat se pot enumera: 4 sisteme de materiale magnetice fără pământuri rare, 2 articole publicate:

1. A.D. Crişan, A. Leca, D. Pantelică, I. Dan, O. Crişan: "Mn-Induced Thermal Stability of L10 Phase in FePt Magnetic Nanoscale Ribbons", *Nanomaterials* **10** (2020) 1278

2. O. Crişan, I. Dan, P. Palade, A. D. Crişan, A. Leca, A. Pantelică: "Magnetic Phase Coexistence and Hard–Soft Exchange Coupling in FePt Nanocomposite Magnets", *Nanomaterials* **10** (2020) 1618

<u>Titlu Fază</u>: Studii privind proprietățile straturilor subțiri din bazele acizilor nucleici ca biomateriale pentru aplicații în electronică

Termen: 13.11.2020

Objective:

Studiul proprietăților optice, morfologice, structurale și electrice ale unor straturi subțiri din bazele acizilor nucleici componente ale structurilor AND și ARN. Bazele azotate ale acizilor nucleici sunt considerate promițătoare ca materiale verzi (biomateriale) pentru aplicații în domeniul electronicii.

Rezultate estimate inițial:

Principalele rezultate preconizate pentru atingerea obiectivului fazei:

-obținerea de straturi subțiri din guanină, citozină și uracil prin metoda evaporării în vid pe diferite substraturi (transparente, Si);

-caracterizarea optică, structurală, morfologică a straturilor depuse;

-realizarea heterostructurilor cu strat din baze ale acizilor nucleici;

-investigarea proprietăților de transport a purtătorilor de sarcină prin aceste heterostructuri;

-studierea efectului unui strat tampon asupra proprietăților electrice;

-investigarea efectului iluminării asupra comportării heterostructurii.

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

Un aranjament periodic de nanostructuri 2D a fost obținut într-un film polimeric (fotorezist) depus pe substrat de sticlă, utilizând tehnica fotolitografică de nanoimprint – UV (UV-Nanoimprint Lithography). Fotorezistul a fost depus prin spin coating pe întreaga suprafață a subtratului de sticlă (4 inch) și tratat pe o plită încinsă la 120^{0} C. Masca (soft mold) care conține negativul rețelei de nanostructuri a fost adusă în contact direct cu polimerul depus pe substratul de sticlă fiind apoi presată prin aplicarea unei forțe controlate. Sub lumină UV filmul polimeric în contact cu masca este solidificat. În final aceasta din urmă este îndepărtată, imprimând în rezistul de pe substrat modelul dorit. Atât pe substrat plan, cât și pe cel imprimat a fost depus electrodul conductor transparent, oxid de staniu și indiu (ITO), folosid tehnica laser pulsată (PLD). Bazele acizilor nucleici (adenină, citozină, guanină, timină și uracil) au fost individual evaporate (pe substrat de sticla plan, nanostructurat și siliciu) într-o incintă vidată ($5x10^{-5}$ mBar). Proprietățile structurilor, astfel obținute au fost puse în evidență efectuând investigații morfologice, optice și electrice folosind următoarele metode: microscopia electronică de baleiaj (SEM), difractia de raze (XRD), spectroscopia FTIR, transmisie UV-VIS și măsurători I-V.



Imaginile SEM ale bazelor acizilor nucleici evaporate pe electrod plan și nanostructurat('): a) adenină; b)citozină; c) guanină; d) timină; e) uracil.



Caracteristicile I-V ale straturilor subțiri de adenină, citozină, guanină, timină, uracil și reprezentarea schematică a structurilor cu electrod 2D investigate

Concluzii și perspective:

Principalele rezultate obținute: a) realizarea de structuri unistrat pe electrod conductor transparent plan și nanostructurat folosind compuși bio-organici, b) realizarea nanostructurării electrodului conductor transparent (ITO), c) depunerea de straturi subțiri din bazele acizilor nucleici prin evaporare termică în vid, d) caracterizare morfologică, optică și electrică a structurilor obținute; e) studiu comparativ între proprietățile structurilor realizate cu electrod plan și electrod nanostructurat.

În prima etapă rețeua 2D de nanostructuri a fost realizată cu succes prin tehnica fotolitografică de nanoimprint, iar straturile subțiri de adenină, citozină, guanină, timină și uracil au fost depuse prin

evaporare termică în vid. Utilizând tehnica PLD, electrodul conductor transparent (ITO) a fost depus atât pe substrat plan, cât și nanostructurat.

Conservarea grupărilor funcționale ale moleculelor bazelor acizilor nucleici în timpul depunerii prin evaporare termică în vid confirmă faptul că această metodă este adecvată pentru prepararea acestor materiale sub formă de straturi subțiri. Imaginile SEM au evidențiat prezența rețelei 2D de nanostructuri după depunerea electrodului ITO și a nucleobazelor, precum și dispunerea moleculară în funcție de particularitățile fiecarei baze. Comparativ cu filmele obținute pe electrod plan, cele realizate pe electrod nanostructurat evidențiază o scădere în transmisie. Proprietățile de emisie ale bazelor acizilor nucleici sunt influențate de nanostructurare și sunt afectate de reflexiile care apar în interiorul cavităților delimitate de pilonii obținuți prin nanoimprint. Caracteristicile I-V înregistrate prezintă un comportament de contact injector pentru structurile realizate pe electrod plan și nanostructurat, mai puțin filmele de adenină și guanină preparate pe electrod ITO nanostructurat.

În concluzie, electrodul conductor transparent nanostructurat a indus modificări în proprietățile optice și electrice ale straturilor bio-organice de adenină, citozină, guanină, timină și uracil, structurile astfel obținute fiind candidați promițători pentru aplicații în optoelectronică.

Din rezumatul prezentat anterior cât și din concluziile enumerate mai sus rezultă că atât obiectivul fazei cât și țintele stabilite menționate au fost atinse. De asemenea, rezultatele obținute au fost diseminate prin trimiterea spre publicare a articolului cu titlul "On the properties of nucleobases thin films evaporated on nanostructured electrode", C. Breazu, M. Socol, N. Preda, O. Rasoga, A. Costas, G. Socol, P. Gabriela, A. Stanculescu, într-un jurnal indexat ISI.

<u>Titlu Fază:</u> Multistraturi Langmuir-Blodgett pe bază de acizi grași și nanotuburi de carbon, dopate cu metaloporfirine. Sinteză, caracterizare și aplicații în senzoristică

Termen: 13.11.2020

Objective:

Multistraturi Langmuir-Blodgett pe bază de acizi grași și nanotuburi de carbon, dopate cu metaloporfirine. Sinteză, caracterizare și aplicații în senzoristică.

Rezultate estimate inițial:

Proiectul are ca țintă dezvoltarea de materiale organice complexe depuse prin tehnica Langmuir Blodgett. Ne propunem să sinterizăm multistraturi Langmuir Blodgett pentru recunoașterea de substanțe chimice toxice în aer și/sau de radiații ultraviolete. Materialul sensibil se va baza pe multistraturi ordonate Langmuir - Blodgett de săruri metalice ale acidului stearic combinate cu structuri nanocarbonice și metaloporfirine. Se vor prepara cu ajutorul metodei Langmuir Blodgett, diverse filme cu grosimi nanometrice și se vor combina în diferite concentrații săruri metalice ale acizilor grași, structuri nanocarbonice și metaloporfirine.

Objectivele specifice ale projectului sunt:

- Prepararea și caracterizarea materialului pe baza de stearați și structuri nanocarbonice (nanotuburi de carbon, fulerene, grafene) depus prin metoda Langmuir-Blodgett.

- Prepararea și caracterizarea materialului pe baza de stearați, structuri nanocarbonice și dopate cu metaloporfirine (Ex. Mn(III)/Fe(III)), depus prin metoda Langmuir-Blodgett.

- Testarea sensibilității și selectivității multistraturilor Langmuir-Blodgett sub influența a diferite gaze toxice și/sau a radiaților ultraviolete.

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

S-au efectuat încercări preliminare pentru obținerea unei soluții omogene de nanotuburi de carbon funcționalizate cu molecule de stearat de bariu, și dopate cu metaloporfirine. Adăugarea unui funcționalizant și anume substanța tensioactivă bazată pe sulfonatul de dodecil-benzen urmată de 30 min ultrasonare a condus la obținerea unei dispersii bune, fapt relevant pentru stabilitatea soluției coloidale.

Nanotuburile folosite în prepararea soluțiilor au fost achiziționate de la firma Alfa Aesar. Stearatul de bariu folosit provine de la Strem Chimicals iar metaloporfirinele folosite și anume porfirina de mangan și porfirina de fier sunt de la Aldrich. Pentru prepararea soluției coloidale compatibile cu depunerea de straturi Langmuir-Blodgett s-a folosit benzenul pentru analiza de înaltă puritate (99.8%).

În cadrul proiectului au fost preparate structuri noi bazate pe stearat de bariu dopat cu nanotuburi de carbon și activate cu metaloporfirine.

S-au preparat straturi simple de stearat de bariu prin metoda Langmuir-Blodgett folosind aparatul KSV 5003. Filmele subțiri sunt alcătuite din din 5 straturi de tip Langmuir-Blodgett depuse pe suporți de sticlă. Am preparat în condiții identice straturi Langmuir-Blodgett cu și fără nanotuburi de carbon. Aseamenea s-au preparat și probe cu nanotuburi de carbon și metaloporfirine.

În scopul urmăririi comportării soluțiilor preparate, înainte de transferul pe suporți de sticla am efectuat cu ajutorul barierelor mobile în cadrul aceluiași ciclu o comprimare până la nivelul optim pentru transferare pe suport, urmată de o decompresiune până la nivelul inițial, și în final, o revenire la nivelul maxim de compresiune. În acest fel am putut studia efectul de histerezis prin care să înțelegem efectul nanotuburilor de carbon asupra proprietăților straturilor complexe.

După caracterizarea materialului de interes depus pe suporți de sticlă, aceleași soluții au fost transferate și suporți de senzori în vederea testării sensibilității și selectivității multistraturilor Langmuir-Blodgett. Astfel, cu ajutorul instalației de depunere de straturi tip Langmuir - Blodgett, s-a realizat tranferul strat cu strat a materialului pe un suport comercial alcătuit dintr-o plăcută de ceramică prevăzută cu electrozi de platină în sistem pieptene.

Determinarea calității împachetării straturilor complexe în fiecare multistrat s-a facut cu ajutorul reflectometriei de radiație X. Pentru aceasta s-a utilizat un difractometru Rigaku SmartLab dotat cu anticatod de Cu, configurația cu fasciculul incident paralel și radiația K α ($\lambda = 1.54178$ Å) și detectorul HyPix-3000 2D Hybrid Pixel Array Detector (în modul 0D). În figura 1 sunt prezentate reflectogramele pentru multistraturile pe bază de stearat de bariu.



Figura 1: *Reflectogramele pentru multistraturile pe bază de stearat de bariu. Săgețile violet indică faza majoritară, cele verzi indică faza minoritară*

În figura 2 sunt ilustrate sensibiltățile obținute în prezența gazului metan CH4 la o temperatură de 100 °C a celor 3 multistraturi LB depuse pe corpi de senzori.



Figura 2: Variația rezistenței electrice a senzorului la sub acțiunea gazului metan a) Senzori cu stearat de bariu și nanotuburi de carbon și stearat de bariu și nanotuburi de carbon și mangan porfirină; b) Senzor cu stearat de bariu și nanotuburi de carbon și fier porfirină.

În cadrul proiectului de cercetare privind dezvoltarea de materiale organice complexe depuse prin tehnica Langmuir-Blodgett (LB) și sinterizarea de multistraturi LB pentru recunoașterea de substanțe chimice toxice în aer și/sau de radiații ultraviolete, am realizat toate obiectivele fazei și evidențiat posibilitatea utilizării multistraturilor LB în producerea de senzori chimici.

Au fost preparate soluții pe bază de stearat de bariu și nanotuburi de carbon, dopate și nedopate cu metaloporfirine de mangan și fier. Ulterior au fost depuse prin metoda Langmuir-Blodgett pe suporți de sticlă și caracterizați structural și optic. Ulterior soluțiile preparate au fost transferate pe corpi de senzor în vedera testării sensibilității multistraturilor Langmuir-Blodgett sub influența gazului metan.

Am evidențiat un efect de creștere a rezistenței electrice sub influența a 1000 ppm de gazul metan (CH₄). Efectul de creștere a rezistenței electrice este mai pronunțat în cazul celor doi senzori dopați cu metaloprofirme în comparație cu cel fără metaloporfirină. Comparând cei doi senzori dopați cu metaloporfirină se poate observa că cel cu porfirină de fier este mai rezistiv și are o pantă mai abruptă a creșterii în rezistență sub influența CH₄ în comparație cu cel dopat cu porfirină de mangan.

Pe baza rezultatelor obținute se va trimite spre publicare în revista cotată ISI, Digest Journal of Nanomaterials and Biostructures un articolul cu titlul aproximativ **"Synthesis and characterization of Langmuir - Blodgett films, based on carbon nanotubes and metaloporphyrins, with sensing aplication"** și cu mulțumiri la Proiect Nucleu Contractul nr. 21N/2019.

Pentru viitor se doresc cercetări suplimentare pentru optimizarea materialului pentru folosirea în detectori de gaze toxice.

<u>Titlu Fază</u>: Material nanocompozit pe bază de calcogenic și porfirine hidrofobe pentru senzori de gaze toxice sau explozive

Termen: 13. 11. 2020

Objective:

Faza are ca obiectiv găsirea de noi materiale nanocompozite pe bază de calcogenic și porfirine hidrofobe pentru a servi drept material activ în senzori de gaze toxice sau explozive.

Rezultate estimate inițial:

În demersul propus pentru găsirea de noi materiale nanocompozite sensibile la gaze toxice sau explozive, ținem seama de rezultatele raportate în literatura de specialitate, de rezultatele proprii obținute în cadrul proiectelor anterioare pe teme înrudite, precum și de rezultatele accesibile prin colaborare cu parteneri din alte institute, care manifestă interes pentru aceeași tematică științifică. Astfel, în cadrul acestei faze am avut o colaborare fructuoasă cu un grup din ICT-AR din Timișoara, condus de Prof. Eugenia Fagadar-Cosma pentru sinteza de porfirine și cu un grup din INFLPR, condus de Dr. Gabriel Socol pentru măsurări de răspuns la gazele toxice.

Cu rezultatele obținute preconizăm să depunem o cerere de brevet de invenție la OSIM, până pe 30 noiembrie 2020, iar după studii și discuții ulterioare cu partenerii implicați, ne propunem să trimitem spre publicare și o lucrare științifică cu titlul orientativ *"Toxic gas sensing at room temperature with new nanocomposite based on chalcogenides and porphyrins"* la o revistă internațională cotată ISI (de ex. Sensors, Aplied Surface Science, Thin Solid Films, Non-Crystalline Solids ori altă revistă de acest fel). Avem în vedere de asemenea și diseminarea rezultatelor obținute aici prin participarea la Conferința Amorphous and Nanostructured Chalcogenides (ANC-10), care se va organiza în iunie-iulie 2021 la Pardubice în Cehia.

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

S-au creat trei noi materiale nanocompozite pe baza materialului calcogenic SnSe₂ sub formă de pulbere policristalină, la care s-au adăugat pe rând trei feluri de porfirine hidrofobe, astfel:

- Co(II)-5-10-15-20-Tetrakis-(4-Metoxiphenil)-porfirină (notată CoPy);

- 5-10-15-20-Tetrakis-Aminophenil-porfirină (notată TAPPy), respectiv:

- Tetraphenil-porfirină (notată TPPy).

Amestecul s-a realizat prin diluarea în același solvent organic în proporții bine definite. Procesul de diluare a fost asistat de o baie de ultrasonare.



Noile nanocompozite după depunerea drop-casting, înainte de tratamentul termic de uscare.



Răspunsul probei S4 la 50 ppm H₂S la T_C.



Morfologia suprafeței probei S4 la o mărire de 50 000 x înaintea măsurării răspunsului la gaze.



Răspunsul probei S4 la 100 ppm H₂S la T_C.



Morfologia suprafeței probei S4 la o mărire de 1 000 x înaintea măsurării răspunsului la gaze.

Obiectivele fazei au fost atinse: s-au găsit două noi materiale nanocompozite pe bază de calcogenic și porfirine hidrofobe - S3 și S4 - pentru a servi drept material activ în senzori de gaze toxice sau explozive.

O caracteristică importantă și un avantaj major pentru posibilele aplicații de senzori pe baza acestor nanocompozite noi, o reprezintă funcționarea ca element activ în senzorul de gaz la temperatură mediului ambiant, ori a temperaturii camerei. Nu este nevoie la aceste nanocompozite ca suportul de senzor să fie încălzit la o temperatură de lucru înaltă, ca în cazul senzorilor clasici pe bază de oxizi metalici.

Pentru viitor ramâne de optimizat materialul, în primul rând încercând să-l facem mai stabil în timp, cu un drift mic sau neglijabil. Relația dintre structura morfologică a nanocompozitului și curba lui de răspuns la un anumit gaz studiat este de asemenea de urmărit.

Cu rezultatele obținute preconizăm să depunem o cerere de brevet de invenție la OSIM până pe 30 noiembrie 2020, iar după studii și discuții ulterioare cu partenerii implicați, ne propunem să trimitem spre publicare și o lucrare științifică cu titlul orientativ *"Toxic gas sensing at room temperature with new nanocomposite based on chalcogenides and porphyrins"* la o revista internațională cotată ISI (de ex. Sensors, Aplied Surface Science, Thin Solid Films, Non-Crystalline Solids ori altă revistă de acest fel). Avem în vedere de asemenea și diseminarea rezultatelor obținute aici prin participarea la Conferința Amorphous and Nanostructured Chalcogenides (ANC-10), care se va organiza în iunie-iulie 2021 la Pardubice în Cehia.

<u>**Titlu Fază:</u>** Studiul defectelor extinse și a interfețelor în heterostructuri feroelectrice epitaxiale fără plumb</u>

Termen: 10.12.2020

Objective:

Analiza microstructurală și microanalitică a filmului subțire feroelectric fără plumb de Bi0.5Na0.5TiO3-BaTiO3 folosind tehnici avansate de microscopie electronică prin transmisie. Se va analiza structura internă, morfologia și compoziția chimică a heterostructurii 0.92Bi0.5Na0.5TiO3-0.08BaTiO3/SrRuO3/SrTiO3 (BNT-BT/SRO/STO).

Rezultate estimate inițial:

Scopul acestui studiu este de a înțelege cât mai bine structura filmului subțire feroelectric de BNT-BT ajungând până la nivel atomic astfel încât să creștem calitatea filmului depus. Creșterea calității filmelor subțiri (cu cât mai puține defecte) conduce la îmbunătățirea proprietăților electrice/feroelectrice devenind astfel un candidat excelent în dezvoltarea dispozitivelor fără plumb.

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

Proba analizată în cadrul acestui studiu este de forma 0.92Bi0.5Na0.5TiO3-0.08BaTiO3/SrRuO3/SrTiO3 (BNT-BT/SRO/STO). Prepararea probei s-a realizat prin depunere cu laser pulsat în condițiile de depunere urmatoare: electrodul inferior de SRO a fost depus la o temperatură a substratului de T = 700 °C, în atmosferă de 0.133 mbar oxigen, cu o fluență laser de 2 J/cm2 și frecvența de 5 Hz. Pentru depunerea stratului BNT-BT, temperatura substratului a fost redusă la 575 °C și atmosfera de oxigen a fost fixată la 0.2 mbar. Pulsul laser a avut aceeași frecvență și fluență ca și pentru depunerea SRO.

Probele TEM au fost preparate în secțiune transversală folosind metoda clasică (prin subțiere ionică) astfel: tăiere, lipire și șlefuire mecanică plan-paralel pe fețele laterale, perpendicular pe direcția cristalină [010] a substratului de SrTiO3. Șlefuirea mecanică a fost urmată de subțierea ionică în fascicul ionic de Ar+ până la transparența electronică cu ajutorul instalației Gatan PIPS.



Imaginea TEM la mărire mică arătând heterostructura BNT-BT/SRO/STO, în secțiune transversală; (b) imaginea HRTEM înregistrată pe o arie care include interfețele BNT-BT/SRO și SRO/STO, indicate prin săgețile albe.



Imagine XSTEM-HAADF înregistrată în interiorul filmului subțire feroelectric de BNT-BT care prezintă defecte structurale periodice; cubul de date EELS-SI împărțit în 52 de părți; graficele concentrațiilor atomice Ti și Ba suprapuse peste imaginea DF extrasă din interiorul dreptunghiul verde din imaginea STEM; graficul raportului Ba/Ti suprapus peste imaginea DF. (b) Imagine HAADF-STEM la mărire mică și în secțiune transversală a heterostructurii BNT-BT/SRO/STO; hărți compoziționale în culori false ale Ti L și Ba M extrase din cubul de date EELS-SI; imaginea RGB compusă prin suprapunerea hărților Ti L și Ba M. (c) Imagine HAADF-STEM la rezoluție atomică la interfața BNT-BT/SRO; hărțile EELS-SI la rezoluție atomică care arată distribuția elementelor Ti și Sr în aria marcată Spectrum Image în imaginea STEM, în orientare [001];imaginea RGB compusă prin suprapunerea hărților Sr L și Ti L.

Concluzii și perspective:

Investigațiile structurale efectuate folosind difracția de electroni au arătat creșterea epitaxială a straturilor pe substratul de STO și faza tetragonală a filmului subțire feroelectric de BNT-BT. Tehnicile TEM avansate și analitice au arătat că heterostructura BNT-BT/SRO/STO prezintă interfață BNT-BT/SRO netedă și defecte în interiorul filmului subțire feroelectric de BNT-BT. Au fost identificate

defecte precum faza Aurivillius și benzile stoichiometrice de Ba în interiorul stratului feroelectric. EELS-SI la rezoluție atomică a arătat o interfață BNT-BT/SRO netedă, fără nicio interdifuzie atomică. Hărțile calitative EELS-SI la mărire mică, obținute pe o arie care include benzi intense, au arătat distribuția chimică a Ti și Ba evidențiind prezența Ba în exces exact în acele benzi. Analiza cantitativă efectuată pe cubul de date EELS-SI a arătat că raportul Ba/Ti are o valoare mai apropiată de valoarea stoichiometrică de 0.08 tocmai în benzile intense. Contrastul de Z din imaginea HAADF-STEM a ajutat la identificarea fazei Aurivillius Bi6Ti5O18 cu cinci straturi perovskitice alternând cu unități [Bi2O2]2+.

Rezultatele obținute în cadrul acestei faze de proiect fac obiectul articolului științific în curs de finalizare pentru publicare intitulat "*Microstructural investigations of epitaxial lead-free 0.92BNT-0.08BT thin film*", articol având ca autori pe R. F. Negrea, C. Ghica, C. Chirila (INCDFM, Măgurele).

<u>Titlu Fază:</u> Modelări teoretice ale efectelor magneto-mecanice în nanomagneți moleculari sau artificiali

Termen: 10.12.2020

Objective:

În cadrul acestei faze s-au investigat din punct de vedere teoretic fenomenele de transport și dinamica de spin în sisteme cuantice hibride. Cele două clase de sisteme studiate au fost: a) firele cuantice plasate în vecinătatea unui nanorezonator în regim "turnstile" și b) nanomagneții artificiali/moleculari care prezintă cuplaje electron-vibron sau spin-rotație. Direcția de studiu dezvoltată este motivată de rezultate experimentale recente și prezintă un grad ridicat de noutate. Ambele clase de sisteme considerate pot fi folosite ca dispozitive nanoelectromecanice.

Rezultate estimate inițial:

Conform planului de realizare asociat prezentei faze s-au obținut următoarele rezultate:

a) Elaborarea formalismului de transport pentru nanomagneți artificiali și/sau fire cuantice

în prezența unui nanorezonator (adaptare și implementare numerică a metodei ecuației master cuantice dincolo de ecuația Redfield);

b) Obținerea și analiza structurii spectrale a sistemelor hibride (e.g. nanomagnet molecular+nanorezonator);

c) Calculul ocupării modurilor vibronice în procesul de transport;

d) Identificarea efectelor specifice regimului tranzitoriu (nemarkovian) și evidențierea canalelor de transport activate de benzile vibraționale laterale (vibrational sidebands);

e) Discutarea efectelor anizotropiei magnetice și ale temperaturii.

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

Au fost calculate energiile sistemului hibrid și stările "îmbrăcate" conținând suprapuneri de moduri vibronice N și numere de spin S_z diferite. Structura multi-vibronică a acestor stări se datorează cuplajului spin-rotație, în timp ce amestecul de numere cuantice magnetice este asociat în parte și cu anizotropia transversală în cazul stărilor neutre (fără electroni). În cazul stărilor încărcate pentru care orbitalul molecular este ocupat cu cel puțin un electron interacția dominantă este cea de schimb. Efectul interacției electron-vibron este tratat exact prin intermediul transformării Lang-Firsov în timp ce contribuția cuplajului spin-rotație este estimată prin diagonalizare numerică, cu controlul sistematic al erorilor de trunchiere în raport cu dimensiunea spațiului vibronic. Un aspect important este că legătura cu rezultatele experimentale presupune considerarea spinilor moleculari S > 1, caz în care transformările unitare folosite pentru aproximarea cuplajului spin-rotație nu sunt adecvate.

În urma calculelor se constată că pentru fiecare stare neutră $|\phi 0, v\rangle$ se poate identifica un număr cuantic S_z cu pondere $A_{S_z}^{(\nu)}$ dominantă, în sensul că $\begin{vmatrix} A_{S_z}^{(\nu)} \end{vmatrix} \gg \begin{vmatrix} A_{S_z}^{(\nu)} \end{vmatrix}$ pentru orice $S_z \neq S_z$. Pentru discutarea tranzițiilor s-a considerat un câmp magnetic în lungul axei z astfel încât în absența cuplajului spin-rotatie energiile stărilor neutre (cu Q = 0) $E_{0=0,\mathcal{K}}$ ordonate sunt $astfel: E_{0, -S_x} < E_{0, -S_x} < E_{0, -S_x+1} < E_{0, -S_x+1} < E_{0, -S_x+2} \cdots . Interacția spin-rotație Hsp-ph aduce$ un amestec suplimentar al stărilor $|\phi 0, v\rangle$ datorită operatorilor de 'salt' S_{\pm}^2 . După cum am precizat, în literatură se consideră în principal tranzițiile între stările de spin extrem $\{\phi_{0,-S_x},\phi_{0,S_x}\}$. Această simplificare este justificată dacă diferența energetică dintre $E_{0,\pm \vec{s}}$ și $E_{0,\pm \vec{s}\mp 2}$ este mult mai mare decât frecvența vibronilor. Acest regim este realizat pentru molecula de TbPc2 dar nu este valabil pentru molecula de Fe4. În calculele noastre au fost luate în calcul toate tranzitiile. În particular, electronii care trec prin sistem pot excita vibroni care sunt ulterior absorbiți favorizând tranziția între 2 ramuri neadiacente, de ex. $|\phi_{0,\zeta_{-}}| \rightarrow |\phi_{0,\zeta_{-}+2}, 0\rangle$ Implementarea numerică a ecuației master în aproximația Markov a fost realizată atât pentru sisteme închise cât și pentru sisteme deschise asemănătoare. Un rezultat intermediar a constat în obținerea oscilațiilor Rabi ale populațiilor asociate perechii de ramuri adiacente $\{\phi_{0,-\vec{S}_{x}},\phi_{0,\vec{S}_{x}}\}$ în regim rezonant $\hbar\omega_{0}=E_{0,\pm\vec{S}}-E_{0,-\vec{S}}$.

(a) Populațiile stărilor neutre cu spin $S = \pm 2$ pentru două valori ale cuplajului spin-rotație α . (b) Valoarea medie a spinul molecular. Alți parametri: D = 0.056 meV, E = D/15, $\epsilon 0 = 0.5$ meV, B = 0.15T, $\omega 0 = 0.069$ meV.

Concluzii și perspective:

Obiectivele proiectului au fost îndeplinite în totalitate iar rezultatele obținute au fost sau vor fi diseminate astfel:

a) A fost publicată în Physical Review B lucrarea "Quantum turnstile regime of nanoelectromechanical systems", autori R. Dragomir, V. Moldoveanu, S. Stanciu, and B. Tanatar (Phys. Rev. B **101** 165409 (2020)). Această lucrare va fi prezentată ca poster și în cadrul conferinței QD2020 (11th International Conference on Quantum Dots 7-11 Dec. 2020, Munich, Germany, https://www.qd2020.de/).

b) Rezultatele obținute pentru sisteme nanoelectromecanice în regim turnstile constituie un capitol important din teza de doctorat a d-lui S. Stanciu.

c) În prezent este în curs de redactare o lucrare țtiințifică asupra dinamicii spinului molecular în nanomagneți în prezența cuplajelor spin-rotație și sarcina-vibron.

d) Metoda elaborată și codul numeric pe baza căruia au fost obținute rezultatele permit o analiza detaliată a efectelor combinate ale mai multor cuplaje la nivel cuantic: electron-vibron, spin-rotație și interacție de spin.

În prezent analizăm procesele de transport pentru diferite valori ale potențialelor chimice astfel încât să obținem efecte consistente ale cuplajului spin-rotație și asupra curentului staționar, acesta din urmă fiind mai convenabil pentru măsurători. De asemenea, avem în vedere și introducerea unor termeni disipativi datorați interacției cu un rezervor bozonic (thermal reservoir).

<u>Titlu Fază:</u> Descompunerea fotoelectrocatalitică a apei cu ajutorul unor sisteme fotocatalitice tricomponente optimizate

Termen: 10.12.2020

Objective:

Obiectivul fazei îl reprezintă prepararea unor sisteme fotocatalitice tricomponente pe bază de TiO2 capabile să efectueze descompunerea fotoelectrocatalitică a H2O cu generare de O2 și H2.

Rezultate estimate inițial:

Odată cu introducerea conceptului de împerechere a diferiților semiconductori pentru reacția de descompunere a apei s-au depus eforturi susținute pentru a dezvolta fotocatalizatori activi pentru acest proces. Din acest punct de vedere, au fost proiectate heterostructuri oxidice diferite bazate pe TiO2, cum ar fi oxizii metalici de tip n/n (de exemplu, ZnO/TiO2) sau de tip p/n (de exemplu Cu20/TiO2 sau NiO/TiO2). 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 curbate pentru a ajunge la un nou echilibru între difuzie și migrare. În acest fel, se formează o regiune de încărcare spațială. Potențialul integrat în această regiune permite o separare eficientă a purtătorilor de sarcină mobili și, din punct de vedere fotocatalizatori foarte flexibili pentru separarea perechilor electron-gol fotogenerate, majoritatea studiilor implică împerecherea a doi semiconductori, apoi pregătirea și optimizarea structurilor cu trei componente, în care un component acționează ca electrocatalizator, ar trebui să creeze oportunități excelente pentru îmbunătățiri suplimentare. Mai mult, conceptul de "cataliză ternară" a fost recent atribuit drept unul de control al efectului a trei catalizatori discreți, fiecare contribuind semnificativ la rezultatul reacției.

În acest sens, pare a fi de interes să explorăm activitatea fotocatalitică a compozitelor cuprinzând diferiți oxizi metalici de tip p și n. În această linie de cercetare, acest studiu urmărește explorarea proprietăților fotocatalitice ale unui sistem ternar care conține unii dintre cei mai utilizați semiconductori oxidici (TiO2 și ZnO)6 și un electrocatalizator excepțional, precum Ni, a cărui utilizare ar putea descrește costurile de producție ale întregului compozit în timp ce efectuează reacția de scindare a apei la conversii mari. Astfel, în cadrul acestui raport sintetic prezentăm doar performanța fotocatalitică a unui nou sistem compus ternar Ni-Zn/TiO2 pentru reacția de descompunere fotocatalitică a apei. **Datele experimentale derivate din caracterizarea acestor materiale sunt prezentate pe larg în raportul** *in extenso* al fazei. Acest raport de activitate demonstrează, de asemenea, nu numai capacitatea acestor compozite ternare de a descompune eficient apa fotocatalitic, dar oferă informații în cadrul științei suprafeței, demonstrând alinierea benzilor pentru ZnO/TiO2/Ni la heterointerfețele locale și formarea semiconductorului degenerat de tip TiO2, în acest caz.

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

Performanțele fotocatalitice ale probelor preparate în reacția de descompunere a apei sunt prezentate în Tabelul 1. Experimentele au fost efectuate atât în absența, cât și în prezența unui donor de

electroni (captator de goluri), cum ar fi tiosulfatul de sodiu sau metanolul. După cum se poate observa, în absența vreunui donor de electroni, probele prezintă activitate fotocatalitică pentru reacția globală de descompunere a apei sub iradiere cu lumină UV, generând H2 și O2 în cantități aproape stoechiometrice. Sistemele compozite bicomponente (Ni-Zn/TiO2 (1:0) și Ni-Zn/TiO2 (0:1)) prezintă, în aceleași condiții de reacție, activități fotocatalitice mai mari decât cele ale componentelor pure.

Acest comportament ar putea fi legat de prezența unei bariere Schottky (Ni-Zn/TiO2 (1:0)) și/sau formarea unei joncțiuni n/n (Ni-Zn/TiO2 (0:1)), care îmbunătățește separarea purtătorilor de sarcină creați în condiții de iradiere cu lumină UV. Din seria compozitelor ternare, s-a dovedit că Ni-Zn/TiO2 (9:1) este cel mai activ fotocatalizator pentru această reacție (130 µmoli de H2 și, respectiv, 62 µmoli de O2 per g de material per oră). Evoluția temporală a reacției globale de descompunere a apei pe fotocatalizatorul Ni-Zn/TiO2 (9:1) în aceleași condiții de iradiere, atât H2 cât și O2 au evoluat constant (130 µmoli de H2 și 62 µmoli de O2 per g de material per oră), rezultatele obținute evidențiind stabilitatea ridicată a acestui fotocatalizator.

Fotoostalizator	Cantitate de H ₂ și O ₂ formată (μ mol g ⁻¹ h ⁻¹)					
	Fără agent de sacrificiu	$Na_2S_2O_3$	Metanol			
TiO ₂ Evonik P25	4 (1)b	9	18			
1 wt.% Pt/TiO ₂	148 (72)	460	10250			
NiO	2 (0)	5	9			
ZnO	2 (0)	7	12			
Ni-Zn/TiO ₂ (1:0)	16 (6)	94	7250			
$Ni-Zn/TiO_2(1:1)$	106 (46)	314	580			
Ni-Zn/TiO ₂ (3:1)	110 (54)	350	608			
Ni-Zn/TiO ₂ (6:1)	112 (54)	456	5120			
Ni-Zn/TiO ₂ (9:1)	130 (62)	560	17100			
$Ni-Zn/TiO_2(0.1)$	24 (10)	115	256			

Tabelul 1. Viteza de generare a H₂ pe fotocatalizatori Ni-Zn/TiO₂ sub iradiere cu lumină UV^[a]

^[a]Condiții de reacție: 25 mg fotocatalizator dispersat în 25 mL soluție (apă deionizată, 1% în greutate Na₂S₂O₃ în apă distilată sau un amestec de apă deionizată și metanol într-un raport volumetric de 4:1); iradiere cu un iluminator MAX-303 (Asahi Spectra) dotat cu modul UV (250–385 nm); 6 ore de iradiere. ^[b]Numerele incluse în paranteze corespund cantității de O₂ format în timpul reacției globale de descompunere fotocatalitică a apei.



Figura 1. Evoluția temporală a reacției globale de descompunere a apei pe fotocatalizatorul Ni-Zn/TiO₂ (9:1). Condiții de reacție: 0.025 g fotocatalizator dispersat în 25 mL apă deionizată; iradiere cu un iluminator MAX-303 (Asahi Spectra) dotat cu modul UV (250–385 nm).

Faza este dedicată dezvoltării unui sistem tricomponent eterogen pentru descompunerea apei în condiții ușoare și pentru a integra principiile fundamentale ale transferului de electroni/goluri induse de lumină într-un dispozitiv fotoelectrochimic cu care să se producă O2 și H2 la un cost competitiv. Obiectivele fazei sunt în concordanță cu obiectivele europene privind Clima, Mediul, Eficiența resurselor și materiile prime și, în special, are un accent puternic pe dezvoltarea de noi strategii/materiale pentru reducerea emisiilor de CO2 și producerea de energie prin descompunerea apei, îmbunătățirea calității vieții umane, care este o prioritate centrală la nivel mondial în contextul încălzirii globale și al problemelor legate de lipsa de energie.

În acest context, în vederea valorificării rezultatelor studiului, ne-am axat pe diseminarea lor la nivel național și internațional prin publicarea rezultatelor într-o revistă cu factor de impact > 4 și propunerea unui brevet național:

1. F. Neaţu, L. E. Abramiuc, M. M. Trandafir, R. F. Negrea, M. Florea, C. M. Teodorescu, Ş. Neaţu, "Degenerated TiO2 Semiconductor Modified with Ni and Zn as Efficient Photocatalysts for Photocatalytic Water Splitting Reaction", ChemCatChem 2020, 12, 4642–4651; DOI: 10.1002/cctc.202000691;

2. F. Neaţu, M. M. Trandafir, M. Florea, Ş. Neaţu, "Procedeu de reducere fotocatalitica a apei in prezenta de fotocatalizatori eterogeni oxizi micsti pe baza de nichel, zinc si titan" - Cererea de brevet nr. A/00716 din 08.11.2019.

În concluzie, în cadrul acestei faze am arătat că materialele Ni-Zn/TiO2 active pentru reacția de descompunere a apei pot fi preparate folosind o metodă de sinteză simplă și cu costuri reduse. O serie de compozite ternare Ni-Zn/TiO2 cu diferite rapoarte Ni:Zn au fost sintetizate prin metoda depunereprecipitare. Materialul care conține raportul Ni:Zn de 9:1 prezintă cea mai importantă fotoactivitate sub iradiere cu lumină UV, viteza de generare a hidrogenului de peste 17 mmoli per gram de material per oră fiind de aproximativ o mie de ori mai mare în comparație cu cea obținută prin utilizarea binecunoscutului fotocatalizator TiO2 Evonik P25. Examinarea alinierii benzii de energie a celui mai bun fotocatalizator Ni-Zn/TiO2 prin spectroscopie fotoelectronică de raze X relevă faptul că TiO2 devine un semiconductor degenerat, care acumulează electroni și sub iradiere UV transferă acești electroni către nanoparticule de Ni, în timp ce golurile sunt direcționate către ZnO.

Rezultatele aduc noi idei despre întrepătrunderea conținutului compozitelor sintetizate și deschid noi oportunități în pregătirea materialelor foarte active pentru producția de H2 bazate pe optimizarea structurilor cu trei componente.

<u>Titlu Fază:</u> Sinteza și caracterizarea hidroxiclorurii de zinc, o alternativă interesantă pentru obținerea nano și micro particulelor de oxid de zinc

Termen: 10.12.2020

Objective:

Sinteza și caracterizarea hidroxiclorurii de zinc, precursor pentru obținerea nano și micro particulelor de oxid de zinc.

Rezultate estimate inițial:

Se va sintetiza hidroxiclorura de zinc și se vor caracteriza proprietățile morfo-structurale și stabilitatea termo-chimică la tratamente termice în aer.

Se vor utiliza multiple tehnici de analiză : difracție de raze X pe pulbere (XRD), microscopie electronică prin transmisie (TEM), spectroscopie în infraroșu cu transformata Fourier (FTIR), spectroscopie de rezonanță electronică de spin (RES). Tranziția de fază structurală se va pune în evidență cu precizie mare prin experimente RES pe probe tratate termic.

Caracterizarea reacției de formare a oxidului de zinc folosind RES la diferite temperaturi de sinteză.

Publicarea pe baza rezultatelor obținute a unei lucrări științifice indexate ISI Web of Science.

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

Sinteza simonkoleitului cu formula moleculară Zn₅(OH)₈Cl₂·H₂O (ZHC) a fost efectuată printr-o metodă simplă de precipitare în amestec apă-etanol (3 :1). Precursorii folosiți în sinteză sunt de puritate ridicată și au fost folosiți fără o purificare suplimentară: ZnCl₂, >98%, Merck; hidroxid de tetrametilamoniu pentahidratat, \geq 97%, Sigma; NaOH, \geq 98%, Honeywell-Fluka; HCl, 32%, Riedel de Haen. Sinteza s-a desfășurat după cum urmează :

- Clorura de zinc se dizolvă într-un amestec apă-etanol (raport molar 3:1) și se acidifiază ușor cu HCl concentrat ; Peste această soluție se adaugă hidroxidul de tetrametilamoniu (TMAH) ca agent de control al creșterii; soluția rezultată se agită la 50°C timp de o oră ; reacția de precipitare prin adăugarea NaOH solid (cantitate stoichiometrică) ; temperatura se ridică la 60°C și reacția se continuă sub agitare continuă pentru încă o oră.

- Precipitatul rezultat este separat prin centrifugare și se spală cu apă și etanol în mod repetat. În final, precipitatul se usucă în aer la 70°C în etuvă.

Pentru tratarea termică a probei, cantități mici de ZHC au fost transferate în tuburi de cuarț calibrate pentru RES (deschise la unul dintre capete pentru eliberarea gazelor) și au fost tratate termic la temperaturile alese pentru diferiți timpi. După tratamentele termice, probele au fost răcite la temperatura camerei și s-au scos fracții mici de probă din tubul de RES în vederea caracterizării acestora prin XRD, TEM, SEM și FTIR.

Difractograma de raze X obținută pentru proba preparată ca atare (Figura 1) prezintă o fază bine cristalizată cu picuri clare de difracție care au fost indexate pentru Zn₅(OH)₈Cl₂H₂O cu structura romboedrică, grup spațial R3m (conform fisei ASTM Nr. JCPDS 77-2311).



Figura 1: Difractogramele de raze X obținute pentru proba ZHC netratată termic și tratată termic la 500°C la diferite intervale de timp.

Morfologia materialului preparat ca atare, fără tratament termic post-sinteză, a fost determinată prin analiza imaginilor TEM (Fig. 2, stânga) și SEM (Fig. 2, centru și dreapta), care au evidențiat plăci mici, cvasi-hexagonale, foarte subțiri (aproximativ 10 nm) cu diametru mediu de ~ 300 nm.



Figura 2: *Imagini TEM si SEM obținute pe proba de ZHC netratată termic.*



Figura 2: Imagini CTEM pentru proba de ZHC netratată și tratată termic la 500°C pentru diferite perioade de timp.

Concluzii și perspective:

Rezultatele preconizate au fost obținute, materialul țintă a fost obținut și a fost caracterizat prin tehnicile experimentale vizate: XRD, TEM, FTIR și RES. Reacția de formare a oxidului de zinc prin transformarea simonkoleitului la diferite temperaturi a fost studiată folosind RES. Obiectivul fazei a fost realizat în totalitate, rezultatele obținute conducând la concluzia că simonkoleitul este întradevăr un precursor bun pentru obținerea de nano- și microparticule de ZnO. În etapele intermediare de transformare a simonkoleitului în oxid de zinc se observa că nu se formează compuși intermediari ci doar că aceste două faze, precursor și produs final, coexistă și formează compozite.

Rezultatele obținute în cadrul acestui studiu au fost publicate în lucrarea indexată ISI Web of Science cu titlul: *Electron paramagnetic resonance and microstructural insights into the thermal behavior of simonkolleite nanoplatelets*, și cu autorii: A. M. Rostas, A. C. Kuncser, D. Ghica, A. Palici, V. A. Maraloiu, I. D. Vlaicu, în jurnalul **Physical Chemistry Chemical Physics** (2020) 22, 9503-9512 (factori scientometrici: F.I. = 3,43; AIS = 0,854).

În continuarea acestei teme, ne propunem un studiu de dopare intenționată a materialului simonkoleit cu ioni de Mn²⁺, studiu în care se va urmări efectul ionilor dopanți asupra caracteristicilor morfo-structurale ale simonkoleitului și de asemenea dacă și în ce mod va fi afectată tranformarea acestuia în oxid de zinc. În plus, caracteristicile morfo-structurale ale oxidului de zinc rezultat în urma transformării termice a simonkoleitului vor fi analizate în funcție de prezența și concentrația ionului dopant, prin tehnici experimentale completate ca XRD, TEM, SEM și RES. În vederea determinării potențialului aplicativ al materialelor dopate, simonkoleit și oxid de zinc dopate cu Mn, se vor efectua studii de fotocataliză și studii de determinare a citotoxicității acestora.

<u>Titlu Fază:</u> Straturi subțiri nanostructurate din supraconductori cu temperatură critică ridicată **Termen:** 10.12.2020

Objective:

Resursele de energie sunt o problemă majoră în cadrul economiei mondiale, iar schimbările climatice cauzate de cresterea emisiilor de CO₂ sunt deja evidente. În aceste conditii, un mare număr de dispozitive și echipamente cu eficiență energetică sporită și mai "prietenoase" cu mediul, bazate pe materiale avansate supraconductoare, vor începe, gradual, să înlocuiască echipamentele și dispozitivele clasice. Chiar în zilele noastre, o serie de echipamente supraconductoare răcite sub temperatură azotului lichid s-au dovedit a fi mult mai eficiente energetic (consum redus la mai putin de 50%), mai fiabile și mai puțin poluante decât variantele pe bază de conductori din cupru: cuptoarele de inducție pentru metalurgia neferoaselor, dispozitive magneto-supraconductoare pentru stocarea energiei, limitatoare de curent de suprasarcină, motoare electrice supraconductoare pentru propulsia navală și pentru turbine eoliene, transformatoare, cabluri supraconductoare pentru amperaje foarte mari, etc. Din perspectivă economică, intrarea puternică pe piață a dispozitivelor crio-electromagnetice (fabricate din fire/benzi supraconductoare) depinde de prețul de cost, exprimat în Euro/kA.m. Deci prețul poate fi redus prin creșterea valorii curentului ce poate fi transportat fără pierderi (curentul critic Ic). În câmpuri magnetice mari, Ic este redus datorită mișcării liniilor de câmp indusă de forța Lorentz și de curgerea (flux creep, flux flow) activată termic. Această disipare poate fi limitată prin introducerea de defecte artificiale (nanoingineria centrilor pinning) care pot fixa liniile de câmp magnetic (vortexuri), limitare care se produce prin scăderea locală a energiei libere în volumul defectelor. Datorită lungimii de coerență foarte mici în cazul materialelor supraconductoare cu temperatură critică ridicată, păstrarea unor valori rezonabile ale curentului critic în câmpuri magnetice de interes practic este condiționată de existența unor defecte de dimensiuni nanometrice, comparabile cu lungimea de coerență. În continuare se depun eforturi în nanotehnologia centrilor pinning, în Europa, SUA, Japonia și, mai recent, China [1]. În cazul straturilor subțiri din aceste materiale, prima metodă eficientă care nu implică costuri mari (ca în cazul iradierii cu ioni grei sau cu neutroni), dezvoltată de Responsabilul de Fază în colaborare cu un grup japonez, a constat în depunerea de nano-particule (nano-insule) pe substrat înainte de creșterea stratului subțire [2,3], urmată de introducerea de nano-particule și/sau nano-roduri prin depuneri succesive din mai multe ținte și/sau prin folosirea de ținte cu nano-incluziuni de faze secundare [4]. Ulterior, introducerea de straturi cu grosimi nanometrice în stratul matrice supraconductor (nanostructuri tip multistrat) s-a dovedit utilă atât pentru păstrarea unor valori ridicate a densității critice de curent în multistraturi de grosimi mai mari (deci curent critic total mult mai mare), cât și pentru crearea de centri pinning adiționali [5].

Obiectivul fazei constă în principal în fabricarea de straturi subțiri nanostructurate din supraconductori cu Tc ridicată folosind decorarea substratului cu nano-insule, arhitectură multistrat și quasi-multistrat, ținte cu nanoincluziuni de fază secundare și combinații ale acestora, folosind o varietate de nano-materiale pentru defecte și diverse arhitecturi. Straturile vor fi caracterizate structural și din punct de vedere al proprietăților supraconductoare în funcție de intensitatea și orientarea câmpului magnetic aplicat, temperatura și arhitectura nanostructurii (nanocompozitului). Fabricarea straturilor supraconductoare nanostructurate se face folosind noul sistem multi-țintă din echipamentul de ablație laser (PLD), caracterizarea structurală se face folosind tehnici avansate de microscopie electronică, iar proprietățile supraconductoare se investighează folosind sistemul de măsurare a proprietăților magnetice SQUID (MPMS) și sistemul de măsurare a proprietăților fizice (PPMS), ambele echipamente produse de *Quantum Design* la temperaturi joase (până la 4 K) și câmpuri magnetice înalte (până la 14 T).

Rezultate estimate inițial:

Pentru atingerea obiectivului fazei se preconizează fabricarea cu success a unui număr semnificativ de straturi supraconductoare nanostructurate, având diverse arhitecturi ale centrilor pinning (defectelor), folosind diverse materiale și metode de nanostructurare. Alte rezultate preconizate sunt : dependențele curentului critic și a fortei de fixare a liniilor de câmp de câmpul magnetic aplicat la temperaturi de interes practic (77 K în cazul răcirii cu azot lichid, 60-65 K în cazul răcirii prin pompare) ; valorile potențialului de pinning la diverse temperaturi și câmpuri magnetice, și, respectiv, liniile de topire a vortexurilor, rezultate din măsurători de susceptibilitate multi-armonică ; modele teoretice originale privitoare la dinamica vortexurilor în aceste straturi supraconductoare nanostructurate. Alte livrabile ale fazei sunt prezentări la manifestări științifice interne și internaționale, precum și minim un articol în revista indexată ISI.

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

Straturile supraconductoare nanostructurate au fost crescute prin PLD pe substraturi monocristaline din SrTiO₃ (STO) folosind un laser cu excimer KrF cu lungimea de undă de 248 nm, cu pulsuri de 30 ns, rate de repetiții de 3-8 Hz, densitatea de energie între 0.7-1.7 J/cm², energia între 240 - 266 mJ, și distanța dintre țintă și substrat de 5 - 6 cm. Temperatura substratului a fost 780 °C sau 800 °C iar presiunea parțială de oxigen în timpul depunerii a fost 450 mTorr. După depunere, straturile au fost răcite la temperatura camerei într-o presiune parțială de oxigen de 450 Torr cu o viteză de răcire de 8° C/min. Cele mai bune rezultate au fost obținute folosind o țintă de YBCO cu 4% nanoincluziuni de BZO, împreună cu nanoinsule de Ag sau nanoparticule de yttria. Măsurătorile de transport electric au fost folosite pentru determinarea temperaturii critice, a anizotropiei curentului critic, și a magneto-

rezistenței. Temperatura critică, densitatea critică de curent, forța de pinning au fost determinate din măsurători de susceptibilitate AC la frecvențe mici, sau din curbele de histerezis magnetic DC. Folosind o metoda originală, dezvoltată de noi, am măsurat (în diverse câmpuri DC constante), dependența susceptibilității în opoziție de faza χ " de amplitudinea câmpului magnetic de excitație AC, la mai multe frecvențe ale câmpului oscilant. Din aceste măsurători am determinat dependența densității critice de curent de frecvență, și, folosind un model dezvoltat de noi, am determinat potențialele de fixare a centrilor pinning pentru diverse arhitecturi de nanostructurare.

Măsurătorile rezistenței/rezistivității în funcție de temperatură, în diverse câmpuri magnetice DC aplicate, oferă informații despre temperaturile critice ale tranziției supraconductoare în respectivele câmpuri, și despre magnetorezistenta materialului în funcție de temperatură, câmp magnetic și orientarea acestuia. În figura 1 sunt prezentate măsurătorile de magnetorezistență în diverse câmpuri magnetice (indicate în figură) pentru un strat supraconductor nanostructurat YBCO dopat cu BZO (4%), cu grosimea de 400 nm, crescut pe substrat decorat cu nano-insule de Ag.



Figura 1: Tranziția rezistivă în câmpuri magnetice DC de 0, 0.2, 0.5, 1, 1.5, 2, 2.5, 3, 3.5, 4, 4.5, 5, 5.5 and 6 T pentru H//c si H//ab pentru un strat supraconductor nanostructurat YBCO dopat cu BZO (4%), cu grosimea de 400 nm, crescut pe substrat decorat cu nano-insule de Ag.

Se observă cu ușurință ca temperatură critică, la care rezistența scade la zero, este de circa 90.5 K în câmp zero, și scade cu creșterea câmpului magnetic DC aplicat.

Concluzii și perspective:

a) Au fost explorate câteva metode de nanostructurare a straturilor supraconductoare folosind diverse tipuri de nanoparticule și condiții termodinamice de autoasamblare, pentru creșterea curentului critic în straturile de YBCO în câmpuri magnetice. Pentru aceasta am crescut un număr semnificativ de probe prin ablație laser;

b) Folosirea nanoinsulelor de Ag în metoda quasi-multistrat a permis creșterea de straturi mai groase, până la 5-6 μm, cu proprietăți îmbunatățite, precum și unei creșteri columnare a YBCO cu apariția unor centri pinning bi-dimensionali puternici la interfețele dintre coloane, datorită efectului catalitic al argintului;

c) Modul de auto-asamblare a fazei secundare BZO joacă un rol important, iar combinația dintre auto-asamblarea bidimensională pe suprafața substratului împreună cu formarea de nano-roduri de fază secundară BZO duce la cel mai mare curent critic în comparație cu alte metode;

d) Măsurătorile de transport cu diverse orientări ale câmpului magnetic față de substrat ne-au permis să determinăm influența orientării câmpului asupra curentului critic și să determinăm condițiile optime de creștere pentru a obține faza secundară în formă de nano-roduri sau de nano-particule, în funcție de aplicația dorită pentru material. Într-o plajă relativ largă de câmpuri magnetice, metoda noastră de nanostructurare a condus la o anizotropie mică a curentului critic, ceea ce este foarte bine pentru aplicații gen solenoid;

e) Folosind o metodologie originală și un model propriu am determinat potențialele de fixare ale centrilor pinning din măsurători de susceptibilitate magnetică AC. Am obținut valori foarte mari ale potențialului de pinning;

f) Opinăm că obiectivele fazei au fost realizate în totalitate. Rezultatele și concluziile obținute în cadrul fazei au fost prezentate în cadrul unor conferințe interne și internaționale, iar un articol este sub tipar în revista ISI Modern Physics Letters B;

g) În viitor ne propunem să continuăm cercetările pe această direcție folosind ca matrice supraconductoare alți cuprați de tip 123 cu pământuri rare în loc de yttriu, și alte faze secundare cu structură perovskit sau dublu-perovskit în loc de zirconat de bariu, evident cu folosirea în continuare a nano-insulelor de argint pe substrat și în quasi-straturi intercalate.

<u>**Titlu Fază**</u>: Calculul factorilor de fază standard în dezintegrarea beta dublă și a deviațiilor lor datorită violării invariantei Lorentz (fazele a si b)

Termen: 10.12.2020

Objective:

Unul dintre obiectivele acestei faze este obținerea unor predicții teoretice cât mai precise ale spectrelor de energie însumată ale electronilor ce sunt emiși în dezintegrarea beta. Al doilea obiectiv este calculul perturbațiilor ce pot apare în aceste spectre energetice datorită încălcării invariantei Lorentz. Aceste două obiective decurg din cercetările care se fac în prezent pentru a se detecta eventuale încălcări ale invariantei Lorentz în diferite procese fizice, unul dintre aceste procese fiind și dezintegrarea beta dublă.

Rezultate estimate inițial:

Atingerea acestor obiective va fi facută prin urmatoarele rezultate preconizate:

a) Calculul precis al factorilor de fază specifici dezintegrării beta duble cu emisie de doi neutrino;

b) Deducerea spectrelor energetice de energie însumată ale electronilor emiși în dezintegrarea beta duble;

c) Calculul deviațiilor la aceste spectre standard datorate unor eventuale încălcări ale invariantei Lorentz;

d) Furnizarea către experimentatori a elementelor necesare, inclusiv ale erorilor teoretice așteptate, pentru ca aceștia să poată analiza datele experimentale și să poată extrage limite ale parametrului de violare Lorentz.

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

În acest capitol deducem formulele abaterilor de la mărimile standard datorate violării invariantei Lorentz. Relevante pentru studiul efectelor LIV in DBD este analiza spectrelor de energie însumată (K = $\epsilon 1 + \epsilon 2$) ale celor doi electroni emiși în dezintegrare. Ele au fost calculate din derivarea factorilor de fază în raport cu K. Am calculat atât spectrele standard cât și deviațiile lor datorită posibilei violări Lorentz. În Fig. 1 am reprezentat aceste spectre standard și deviațiile lor, normate la unitate. Cele 3 curbe reprezintă spectre obținute cu folosirea diferitelor aproximații pentru funcțiile Fermi.



În această lucrare am calculat cu precizie superioară altor calcule raportate până în prezent în literatura de specialitate spectrele electronice de energie însumată ce pot fi masurate în DBD. Aceste spectre pot suferi distorsiuni datorate unei posibile violări a invariantei Lorentz. Calculele noastre teortice au fost însoțite de erorile posibile, datorate utilizării unor aproximații mai puțin bune a funcțiilor Fermi, a valorilor Q și a utilizării în calcul a factorilor cinematici. De asemenea, am calculat și energiile la care se așteaptă ca efectele LIV să fie maxime. Studiul nostru este foarte util pentru experimentatorii care caută efecte LIV în DBD și se încadrează în eforturile conjugate de a găsi dovezi de violare a invariantei Lorentz în diferite procese fizice.

Rezultatele obținute au fost acceptate pentru publicare în Journal of Physes G (2020), o revistă indexată ISI cu ASI = 1.4. După publicare, am fost contactați de membri ai unor experimente importante de DBD (NEMO3 și Majorana) care au solicitat furnizarea de detalii de calcul necesare analizelor lor, experimentarea privind punerea în evidență a violării Lorentz în dezintegrarea beta dublă.

Considerăm că obiectivele fazei au fost pe deplin îndeplinite.

De asemenea, acest studiu a deschis calea spre continuarea cercetărilor posibilelor efecte LIV în experimente DBD, prin investigarea spectrelor electronice singulare și a corelațiilor unghiulare între electronii emiși în dezintegrarea beta dublă.

<u>Titlu Fază:</u> Tutorial pentru metode teoretice pe baza modelelor Jaynes-Cummings - și Tavis Cummings

Termen: 10.12.2020

Objective:

Această fază conține o primă parte a unui tutorial dedicat unor aspecte teoretice relevante pentru o serie de rezultate experimentale realizate cu sisteme cuantice hibride. Acestea din urmă fac obiectul unor studii experimentale de frontieră care depășesc cu mult cadrul experimentelor 'clasice' din optica cuantică.

Spre deosebire de monografiile consacrate am ales să prezentam alături de calculele teoretice și metodele numerice care ilustrează diverse fenomene relevante. Precizăm că cel puțin după informațiile pe care le avem un astfel de tutorial nu a fost niciodată disponibil pentru studenții facultăților de fizică sau pentru tinerii cercetători din România. Tutorialul este redactat în limba engleză iar folosirea modulelor de calcul numeric nu necesită licență, fiind construite în limbaje de programare open-source (Python si Fortran).

Rezultate estimate inițial:

Conform planului de realizare asociat prezentei faze s-au obținut urmatoarele rezultate:

i) Introducerea sistematică a fenomenelor și problemelor teoretice asociate unor experimente recente din optica cuantică;

ii) Pachet numeric pentru simularea dinamicii sistemelor hibride din optica cuantică (se pun la dispoziție atât coduri scrise în limbajul Pyhton cât și în limbajul Fortran 90);

iii) Analiza diferitelor regimuri ale interacției electron-foton și a aproximațiilor relevante.

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

Un sistem cuantic hibrid este format din cel puțin două componente caracterizate de grade de libertate cu naturi diferite. Exemplul cel mai cunoscut este reprezentat de un atom ale cărui stări sunt excitate prin interacția cu modurile cuantificate ale radiației electromagnetice. O clasă largă de fenomene datorate interacției materiei cu câmpuri externe poate fi descrisă de așa-numitul hamiltonian Rabi cuantic:

$$H_R = \frac{\hbar\omega_a}{2}\sigma_z^{\dagger} + \hbar\omega_c a^{\dagger}a + \hbar g(\sigma_+ + \sigma_-)(a^{\dagger} + a), \qquad (1)$$

unde $\hbar\omega_{\alpha} = E_{\sigma} - E_{g}$ reprezintă diferența energetică dintre nivelele de energie asociate stării fundamentale $|g\rangle$ și primei stări excitate $|e\rangle$, ω_{c} este frecvența modului optic descris de operatorii de creeare și anihilare pentru oscilatorul armonic cuantic iar σ_{x} si σ_{\pm} sunt operatori de tip Pauli. Reducerea hamiltonianului la subspațiul stărilor {e,g} este argumentată de faptul că frecvența modului optic nu poate activa nivele superioare de energie. În acest sens hamiltonianul Rabi reprezintă un model *efectiv* a cărui valabilitate trebuie confirmată fie prin compararea cu experimentul fie prin analiza teoretică.

Având în vedere posibilele aplicații ale sistemelor hibride în tehnologia informației și spintronică sistemul de 2 nivele este numit generic qubit (quantum bit), dar detaliile acestuia nu trebuie neglijate și sunt esențiale în implementarea unor porți cuantice eficiente.

Clasa de experimente pentru care sistemul care interacționeaza cu modurile electromagnetice ale unei cavități este un dot cuantic (quantum dot - QD) alcătuiește deja un domeniu de cercetare bine definit, numit electrodinamică cuantică a cavităților (cavity quantum electrodynamics -c-QED). O altă direcție dezvoltată și mai recent are la bază interacția dintre un qubit supraconductor realizat cu joncțiuni Josephson și modurile cuantificate ale unui rezonator (TLR - transmission line resonator). Deoarece astfel de sisteme sunt până la un punct descrise intuitiv ca elemente de circuit această direcție se numește electrodinamică cuantică de circuit (circuit QED).

Elementul cheie pentru observarea fenomenelor optice este parametrul g care descrie tăria interacției dintre cele 2 nivele și modul cavității. În funcție de sistemul implicat în procesele fizice g capată diverse valori. Dificultatea constă în a asigura experimental valori cât mai mari ale lui g.

Mai jos prezentăm câteva rezultate cheie care evidențiază efecte fizice complet netriviale în sisteme hibride qubit-rezonator ce pot fi descrise cu modelul Jaynes-Cummings. Parametrii folosiți în aceste experimente pot fi imediat folosiți în codurile numerice puse la dispoziție. Astfel se pot ilustra imediat structura spectrală și dinamica sistemelor.

• Doturi cuantice active optic imersate în cavități. Exploatând nivelele excitonice ale unui dot cuantic Reithmeier et al. au observat despicarea Rabi asociată stării fundamentale (vacuum Rabi splitting). Rezultatele prezentate ulterior de Hennessy et al. tot pentru sisteme de doturi cuantice aparțin de asemenea regimului de cuplaj tare ($\hbar g = 74\mu eV$, $\hbar \kappa = 35\mu eV$, $\hbar \gamma = 100\mu eV$). În aceste experimente doturile cuantice acționează ca emițători cuantici (quantum emitters) iar populația nivelului excitonic manifestă un comportament oscilant în urma proceselor de emisie și absorbție de fotoni.

• Qubit-uri supraconductoare. Considerând un qubit supraconductor (cunoscut în literatură ca Josephson qubit sau Cooper pair box) în interacție cu modurile de vibrație cuantificate ale unui ghid de undă coplanar Wallraff *et al.* au evidențiat pentru prima oară un cuplaj puternic care implică fotoni cu frecvență în domeniul microundelor. Acest experiment a deschis defapt investigațiile în domeniul electrodinamicii cuantice de circuit (circuit-QED). Un cuplaj electron-foton puternic a fost obținut ulterior de către Fink *et al.*, deoarece în acest experiment $g/2\pi = 154MHz$ și $\kappa/2\pi = 0.9MHz$. Mai mult, aceste măsurători au permis pentru prima dată identificarea (indirectă) a oscilațiilor Rabi de ordin superior, caracterizate de o despicare Rabi cu dependență neliniară în raport cu numărul de fotoni de tipul $g\sqrt{n}$. Acest experiment confirmă esența cuantică a interacției dintre ghidul de undă și qubit.

• Doturi cuantice duble și qubit-uri multiple. În optica cuantică o colecție de N sisteme cu 2 nivele sunt descrise teoretic de un model Jaynes-Cummings generalizat cunoscut sub numele de hamiltonian Tavis-Cummings-Dicke Hamiltonian (TCD). Cazurile cele mai simple N=2,3 au fost deja implementate experimental și prezintă efecte foarte interesante. Spre exemplu, Fink *et al.* au măsurat spectrul de transmisie optică al unei rețele de trei qubits supraconducturi ce interacționează simultan cu un resonator în domeniul microundelor. În pofida faptului că modelul TCD este tot unul efectiv, obținut în aproximația RWA, el reproduce cu succes măsurătorile. Ulterior un sistem similar conținând două doturi cuantice duble în interacție cu un nanorezonator a fost dezvoltat de Deng *et al.* În acest caz s-au pus în evidență corelații curent-curent iar amplitudinea semnalului de reflexie al nanorezonatorului prezintă o serie de dip-uri care poate fi fitată destul de bine de modelul TCD.

Concluzii și perspective:

Obiectivele fazei au fost îndeplinite în totalitate. Rezultatul principal constă în redactarea unui prime părți a unui tutorial dedicat metodelor teoretice recente pentru investigarea sistemelor cuantice de tip qubit-nanorezonator. Au fost de asemenea prezentate și pot fi puse la dispoziție module de calcul numeric pentru analiza spectrală a unor hamiltonieni efectivi.

<u>Titlu Fază:</u> Tutorial pentru metode teoretice pe baza modelului Rabi cuantic Termen: 10.12.2020 Obiective:

Această fază completează etapa anterioară a proiectului dedicată metodelor teoretice pe baza modelelor Jaynes-Cummings și Tavis-Cummings. Obiectivul principal constă în prezentarea celor mai recente rezultate experimentale și teoretice supra sistemelor cuantice hibride în regim de cuplaj foarte puternic. În acest context termenul 'cuplaj' definește tăria interacției dintre un sistem cuantic cu 2 nivele (numit qubit) și modurile cuantificate ale radiației electromagnetice (de ex. ale unui rezonator de microunde sau ale unei cavități cuantice).
Rezultate estimate inițial:

Conform planului de realizare asociat prezentei faze s-au obținut următoarele rezultate:

a) Evidențierea rezultatelor experimentale recente în regim de cuplaj puternic;

b) Analiza spectrală a Hamiltonianului Rabi (studiu analitic și numeric);

c) Analiza dinamicii sistemelor hibride în regimul de cuplaj puternic.

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

În această etapă continuăm prezentarea într-un mod accesibil a unor metode teoretice avansate pentru studiul sistemelor cuantice hibride cu posibile aplicații în optoelectronică cuantică și spintronică. Dacă în prima parte a proiectului au fost introduse conceptele esențiale din optica cuantică și modelul Jaynes-Cummings, în această parte vom arăta că regimurile de interacție a materiei cu substanță obtinute în experimente recente reclamă depășirea acestui model.

Concluzii și perspective:

Obiectivele fazei au fost îndeplinite în totalitate. Rezultatul principal constă în redactarea părții finale a unui tutorial dedicat metodelor teoretice recente pentru investigarea sistemelor cuantice de tip qubit-nanorezonator în regim de cuplaj puternic. Au fost de asemenea prezentate și pot fi puse la dispoziție module de calcul numeric pentru analiza spectrală a unor hamiltonieni efectivi.

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

Тір	Nr. realizat în anul 2020
Documentații	9
Studii	3
Lucrări	167
Planuri	-
Scheme	-
Altele asemenea (se vor specifica)	-

Din care:

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

Nr. Crt	Titlul	Jurnal	Autori	FI	AIS	Q-JCR	Q-ESI
1.	Lorentz violation effects in 2 v beta beta decay	Journal of physics g- nuclear and particle physics, 47 ,055112 (2020)	Nitescu, O; Ghinescu, S; Stoica, S	2.415	0.922	Q2	Q2
2.	Distribution and spectrophotometric classification of basaltic asteroids	Monthly notices of the royal astronomical society, 491 , pp.5966-5979 (2020)	Mansour, JA; Popescu, M; de Leon, J; Licandro, J	5.356	1.204	Q1	Q1
3.	Beta(-)-Decay Half- Lives of Even-Even Nuclei Using the Recently Introduced	Universe, 6 ,5 (2020)	Nabi, JU; Ishfaq, M; Nitescu, O; Mirea, M; Stoica, S	1.752	0.585	Q3	Q4

				1	1	1	1
	Phase Space Recipe						
4.	Hierarchical composites of B4C- TiB2 eutectic particles reinforced with Ti	Ceramics international,46, pp.28132-28144 (2020)	Solodkyi, I; Bogomol, I; Bolbut, V; Loboda, P; Kuncser, A; Vasylkiv, O; Badica, P	3.830	0.479	Q1	Q1
5.	Ionophore- Nafion (TM) modified gold- coated electrospun polymeric fibers electrodes for determination of electrolytes	Electrochimica acta, 363 ,137239 (2020)	Aldea, A; Matei, E; Leote, RJB; Rau, I; Enculescu, I; Diculescu, VC	6.215	0.877	Q1	Q1
6.	Temperature dependence and defect related structure, photoluminescence, (ferro)magnetism and ammonia sensitivity of un- doped nanocrystalline ZnO	Materials science and engineering b-advanced functional solid-state materials, 262 ,114748 (2020)	Mihalache, V; Secu, M; Negrila, C; Bercu, V; Mercioniu, I; Leca, A	4.706	0.605	Q1	Q1
7.	Multilevel Memristive GeTe Devices	Physica status solidi-rapid research letters,,2000475 ()	Velea, A; Dumitru, V; Sava, F; Galca, AC; Mihai, C	2.291	0.679	Q2	Q2
8.	Structure of K alpha(1,2)- and K beta(1,3)-emission x-ray spectra for Se, Y, and Zr	<i>Physical review</i> a, 102 ,052820 (2020)	Ito, Y; Tochio, T; Yamashita, M; Fukushima, S; Vlaicu, AM; Marques, JP; Sampaio, JM; Guerra, M; Santos, JP; Syrocki, L; Slabkowska, K; Weder, E; Polasik, M; Rzadkiewicz, J; Indelicato, P; Menesguen, Y; Lepy, MC; Parente, F	2.808	1.020	Q2	Q1
9.	Effect of proton fluence on the superconducting properties of MgB2. Irradiated with protons of high energy	Physica c- superconductivity and its applications, 578 ,1353734 (2020)	Sandu, V; Ionescu, AM; Ivan, I; Craciun, L; Aldica, G	1.241	0.269	Q4	Q2
10.	Nanostructured Cobalt Doped Barium Strontium Titanate Thin Films with Potential in CO2 Detection	Materials, 13 ,4797 (2020)	Ciobota, CF; Piticescu, RM; Neagoe, C; Tudor, IA; Matei, A; Dragut, DV; Sobetkii, A; Anghel, EM; Stanoiu, A; Simion, CE; Florea, OG; Bejan, SE	3.057	0.543	Q2	Q1
11.	Methane Combustion Using	Materials,13,4888 (2020)	Florea, OG; Stanoiu, A; Gheorghe, M; Cobianu,	3.057	0.543	Q2	Q1

	Pd Deposited on CeOx-MnOx/La- Al2O3 Pellistors		C; Neatu, F; Trandafir, MM; Neatu, S; Florea, M; Simion, CE				
12.	Effect of titanium oxide nanoparticles on the dielectric properties and ionic conductivity of a new smectic bis- imidazolium salt with dodecyl sulfate anion and cyanobiphenyl mesogenic groups	Journal of molecular liquids, 317 ,113939 (2020)	Ganea, CP; Circu, V; Manaila-Maximean, D	5.065	0.619	Q1	Q1
13.	Photodetecting properties of single CuO-ZnO core-shell nanowires with p-n radial heterojunction	Scientific reports,10,18690 (2020)	Costas, A; Florica, C; Preda, N; Kuncser, A; Enculescu, I	3.998	1.263	Q1	Q1
14.	About detecting very low mass black holes in LAr detectors	Journal of cosmology and astroparticle physics,,046 (2020)	Lazanu, I; Lazanu, S; Parvu, M	5.210	1.164	Q1	Q1
15.	Effect of Cr and V coatings on W base material in W- Eurofer brazed joints for fusion applications	Fusion engineering and design, 159 ,111748 (2020)	De Prado, J; Sanchez, M; Stan, G; Galatanu, A; Urena, A	1.692	0.266	Q1	Q1
16.	Photoluminescence as a Valuable Tool in the Optical Characterization of Acetaminophen and the Monitoring of Its Photodegradation Reactions	Molecules, 25 ,4571 (2020)	Daescu, M; Matea, A; Negrila, C; Serbschi, C; Ion, AC; Baibarac, M	3.267	0.601	Q2	Q1
17.	Secondary Crystalline Phases Influence on Optical Properties in Off- Stoichiometric Cu2S-ZnS-SnS2 Thin Films	Materials, 13 ,4624 (2020)	Sava, F; Diagne, O; Galca, AC; Simandan, ID; Matei, E; Burdusel, M; Becherescu, N; Becherescu, V; Mihai, C; Velea, A	3.057	0.543	Q2	Q1
18.	Characterization of C-Ti multilayer thin films obtained by TVA technology	Nanoengineering: fabrication, properties, optics, thin films, and devices xvii, 11467 ,114671r (2020)	Ciupina, V; Lungu, CP; Vladoiu, R; Prodan, GC; Porosnicu, C; Vasile, E; Prodan, M; Nicolescu, V; Dinca, V; Manu, R; Cupsa, O; Velea, A	Not available	Not availa ble	Not availabl e	Not availa ble
19.	Morphological and structural investigation of the	Studia universitatis babes- bolyai chemia, 65 , pp.245- 258 (2020)	Stingescu, L; Cadar, C; Cotet, LC; Baia, L; Saszet, K; Magyari, K;	0.494	0.036	Q4	Q4

			1	1	1	1	1
	poly(vinyl chloride)/graphene oxide composites		Mihis, AG; Fort, CI; Stroe, M; Matei, E; Nila, A; Anghel, I; Baia, M; Baibarac, M; Danciu, V				
20.	Wafer-scale graphene- ferroelectric HfO2/Ge- HfO2/HfO(2)transist ors acting as three- terminal memristors	Nanotechnology, 31 ,495207 (2020)	Dragoman, M; Dinescu, A; Dragoman, D; Palade, C; Moldovan, A; Dinescu, M; Teodorescu, VS; Ciurea, ML	3.551	0.706	Q2	Q1
21.	Sn-doped TiO2 nanotubular thin film for photocatalytic degradation of methyl orange dye	Journal of physics and chemistry of solids, 147 ,109609 (2020)	Bjelajac, A; Petrovic, R; Vujancevic, J; Veltruska, K; Matolin, V; Siketic, Z; Provatas, G; Jaksic, M; Stan, GE; Socol, G; Mihailescu, IN; Janackovic, D	3.442	0.429	Q2	Q1
22.	Towards phase pure kesterite Cu2ZnSnS4 absorber layers growth via single step free sulfurization electrodeposition under a fix applied potential on Mo substrate	Journal of alloys and compounds, 842 ,155821 (2020)	Azmi, S; Moujib, A; Layachi, OA; Matei, E; Galca, AC; Zaki, MY; Secu, M; Rusu, MI; Grigorescu, CEA; Khoumri, EM	4.650	0.630	Q1	Q1
23.	Investigation of the effect of sodium azide on the coordination mode of flexible ONO- donor hydrazone ligand in preparing manganese coordination compounds	Polyhedron, 190 ,114751 (2020)	Bikas, R; Darvishvand, M; Kuncser, V; Schinteie, G; Siczek, M; Lis, T	2.343	0.257	Q2	Q1
24.	Simple and clean method for obtaining Sn nanoparticles for hydrophobic coatings	Materials letters, 278 ,128419 (2020)	Buruiana, AT; Sava, F; Matei, E; Zgura, I; Burdusel, M; Mihai, C; Velea, A	3.204	0.440	Q2	Q1
25.	Magneto- functionalities of La 1-x A x MnO 3 (A = K; Ba) synthesized by flash combustion method	Journal of alloys and compounds, 839 ,155546 (2020)	Bouzid, SA; Galca, AC; Sajieddine, M; Kuncser, V; Rostas, AM; Iacob, N; Enculescu, M; Amarande, L; Pasuk, I; Essoumhi, A	4.650	0.630	Q1	Q1
26.	Structure and water uptake in	Acta materialia, 199 , pp.297-310 (2020)	Wachowski, SL; Szpunar, I; Sorby, MH;	7.656	1.887	Q1	Q1

	BaLnCo(2)O(6- delta) (Ln =La, Pr, Nd, Sm, Gd, Tb and Dy)		Mielewczyk-Gryn, A; Balaguer, M; Ghica, C; Istrate, MC; Gazda, M; Gunnaes, AE; Serra, JM; Norby, T; Strandbakke, R				
27.	Tuning structural and magnetic properties of Fe oxide nanoparticles by specific hydrogenation treatments	<i>Scientific reports</i> , 10 ,17174 (2020)	Greculeasa, SG; Palade, P; Schinteie, G; Leca, A; Dumitrache, F; Lungu, I; Prodan, G; Kuncser, A; Kuncser, V	3.998	1.263	Q1	Q1
28.	Second magnetization peak, rhombic-to-square Bragg vortex glass transition, and intersecting magnetic hysteresis curves in overdoped BaFe2(As1-xPx)(2) single crystals	Scientific reports,10,17274 (2020)	Miu, L; Ionescu, AM; Miu, D; Burdusel, M; Badica, P; Batalu, D; Crisan, A	3.998	1.263	Q1	Q1
29.	Dielectric investigations on carbon nanotubes doped polymer dispersed liquid crystal films	European physical journal plus, 135 ,797 (2020)	Ganea, CP; Manaila- Maximean, D; Circu, V	3.228	0.487	Q1	Q2
30.	MAPLE Deposition of Binary and Ternary Organic Bulk Heterojunctions Based on Zinc Phthalocyanine	Coatings, 10 ,956 (2020)	Socol, M; Preda, N; Petre, G; Costas, A; Rasoga, O; Popescu- Pelin, G; Mihailescu, A; Stanculescu, A; Socol, G	2.436	0.376	Q2	Q2
31.	Structural Changes in Palladium Nanofilms during Thermal Oxidation	<i>Inorganic materials</i> , 56 , pp.1020-1026 (2020)	Samoylov, AM; Ivkov, SA; Pelipenko, DI; Sharov, MK; Tsyganova, VO; Agapov, BL; Tutov, EA; Badica, P	0.844	0.120	Q4	Q2
32.	Fundamental studies of hafnia-hematite nanoparticles	Journal of physics and chemistry of solids, 145 ,109567 (2020)	Ferris, L; Allwes, M; Diamandescu, L; Perrin, A; mchenry, M; Sorescu, M	3.442	0.429	Q2	Q1
33.	Chalcogenide Science in Romania	Physica status solidi b- basic solid state physics,,2000284 ()	Lorinczi, A; Badica, P; Botila, T; Ciurea, M; Velea, A; Popescu, A; Socol, G; Antohe, S; Nedelcu, N; Sobetkii, A	1.481	0.362	Q3	Q1
34.	HfO2-Al2O3 Dielectric Layer for a Performing Metal- Ferroelectric-	Acs applied electronic materials,2, pp.2780-2787 (2020)	Silva, JPB; Sekhar, KC; Veltrusk, K; Matolin, V; Negrea, RF; Ghica, C; Oliveira, MJS; Moreira,	Not available	Not availa ble	Not availabl e	Not availa ble

	Insulator- Semiconductor Structure with a Ferroelectric 0.5Ba(Zr0.2Ti0.8)O -3- 0.5(Ba0.7Ca0.3)TiO 3 Thin Film		JA; Pereira, M; Gomes, MJM				
35.	Effect of starting materials and sintering temperature on microstructure and optical properties of Y2O3:Yb(3+)5 at% transparent ceramics	Journal of advanced ceramics,, pp ()	Yavetskiy, RP; Balabanov, AE; Parkhomenko, SV; Kryzhanovska, OS; Doroshenko, AG; Mateychenko, PV; Tolmachev, AV; Li, J; Jiang, N; Gheorghe, L; Enculescu, M	2.889	0.469	Q1	Q3
36.	Textile Materials Treatment With Mixture of TiO2:N and SiO(2) Nanoparticles for Improvement of Their Self-Cleaning Properties	Journal of natural fibers,, pp ()	Mateescu, AO; Mateescu, G; Burducea, I; Mereuta, P; Chirila, L; Popescu, A; Stroe, M; Nila, A; Baibarac, M	2.622	0.263	Q1	Q3
37.	Mechano-chemical versus co- precipitation for the preparation of Y- modified LDHs for cyclohexene oxidation and Claisen-Schmidt condensations	Applied catalysis a- general, 605 ,117797 (2020)	Pavel, OD; Stamate, AE; Zavoianu, R; Bucur, IC; Birjega, R; Angelescu, E; Parvulescu, VI	5.006	0.797	Q1	Q1
38.	Physico-Chemical Properties and In Vitro Antifungal Evaluation of Samarium Doped Hydroxyapatite Coatings	Coatings,10,827 (2020)	Ciobanu, SC; Iconaru, SL; Predoi, D; Prodan, AM; Predoi, MV	2.436	0.376	Q2	Q2
39.	Fabrication of Silver- and Zinc- Doped Hydroxyapatite Coatings for Enhancing Antimicrobial Effect	Coatings, 10 ,905 (2020)	Predoi, D; Iconaru, SL; Predoi, MV	2.436	0.376	Q2	Q2
40.	A New Zinc Phosphate-Tellurite Glass for Magneto- Optical Applications	Nanomaterials, 10 ,1875 (2020)	Elisa, M; Stefan, RC; Vasiliu, IC; Iordache, SM; Iordache, AM; Sava, BA; Boroica, L; Dinca, MC; Filip, AV; Galca, AC; Bartha, C; Iacob, N;	4.324	0.671	Q2	Q1

			Rusu, MI; Eftimie, M;				
41.	Photoluminescence as a Complementary Tool for UV-VIS Spectroscopy to Highlight the Photodegradation of Drugs: A Case Study on Melatonin	Molecules, 25 ,3820 (2020)	Daescu, M; Toulbe, N; Baibarac, M; Mogos, A; Lorinczi, A; Logofatu, C	3.267	0.601	Q2	Q1
42.	Copper(II) Complexes with Mixed Heterocycle Ligands as Promising Antibacterial and Antitumor Species	Molecules, 25 ,3777 (2020)	Rostas, AM; Badea, M; Ruta, LL; Farcasanu, IC; Maxim, C; Chifiriuc, MC; Popa, M; Luca, M; Korosin, NC; Korosec, RC; Bacalum, M; Raileanu, M; Olar, R	3.267	0.601	Q2	Q1
43.	Correlation of native point defects and photocatalytic activity of annealed ZnO nanoparticle studied by electron spin resonance and photoluminescence emission	Semiconductor science and technology, 35 ,095035 (2020)	Nguyen, XS; Nguyen, MQ; Trinh, XT; Joita, AC; Nistor, SV	2.361	0.581	Q2	Q2
44.	One-dimensional coordination polymers constructed from copper(II) ions and chromato bridges: Synthesis, crystal structures and thermal analysis	Inorganica chimica acta, 509 ,119663 (2020)	Dumbrava, A; Maxim, C; Olar, R; Badea, M; Stefan, M; Grecu, MN; Andruh, M	2.304	0.281	Q2	Q1
45.	Magnetic properties of BaNi x Fe 12-x O 19 (x=0.0-1.0) hexaferrites, synthesized by citrate -gel auto - combustion and sintered by conventional and spark plasma methods	Journal of alloys and compounds, 831 , pp (2020)	Cernea, M; Greculeasa, SG; Radu, R; Aldica, G; Ganea, P; Surdu, VA; Tanasa, ET; Cioangher, M; Iacob, N; Costescu, RM	4.650	0.630	Q1	Q1
46.	Degenerated TiO(2)Semiconduct or Modified with Ni and Zn as Efficient Photocatalysts for the Water Splitting Reaction	<i>Chemcatchem</i> , 12 , pp.4642- 4651 (2020)	Neatu, F; Abramiuc, LE; Trandafir, MM; Negrea, RF; Florea, M; Teodorescu, CM; Neatu, S	4.853	0.984	Q2	Q1

47.	Magnetic Phase Coexistence and Hard-Soft Exchange Coupling in fept Nanocomposite Magnets	Nanomaterials, 10 ,1618 (2020)	Crisan, O; Dan, I; Palade, P; Crisan, AD; Leca, A; Pantelica, A	4.324	0.671	Q2	Q1
48.	Combining Fluorinated Polymers with Ag Nanoparticles as a Route to Enhance Optical Properties of Composite Materials	Polymers, 12 ,1640 (2020)	Satulu, V; Mitu, B; Ion, V; Marascu, V; Matei, E; Stancu, C; Dinescu, G	3.426	0.546	Q1	Q1
49.	Graphene Oxide Concentration Effect on the Optoelectronic Properties of ZnO/GO Nanocomposites	Nanomaterials, 10 ,1532 (2020)	Boukhoubza, I; Khenfouch, M; Achehboune, M; Leontie, L; Galca, AC; Enculescu, M; Carlescu, A; Guerboub, M; Mothudi, BM; Jorio, A; Zorkani, I	4.324	0.671	Q2	Q1
50.	Removal and Oxidation of As(III) from Water Using Iron Oxide Coated CTAB as Adsorbent	Polymers, 12 ,1687 (2020)	Predoi, D; Iconaru, SL; Predoi, MV; Motelica- Heino, M	3.426	0.546	Q1	Q1
51.	Coagulating and flocculating ferrihydrite: application of zinc acetate salt	Environmental science- water research & technology, 6 , pp.2057-2064 (2020)	Islam, S; Das, S; Mishra, G; Das, B; Malakar, A; Carlomagno, I; Meneghini, C; De Giudici, G; Goncalves, LPL; Sousa, JPS; Kolen'ko, YV; Kuncser, AC; Ray, S	3.449	0.815	Q1	Q3
52.	Reusable on-plate immunoprecipitation method with covalently immobilized antibodies on a protein G covered microtiter plate	Journal of immunological methods, 483 ,112812 (2020)	Korodi, M; Rakosi, K; Baibarac, M; Fejer, SN	1.901	0.799	Q3	Q1
53.	Laser synthesis of TiO2-carbon nanomaterial layers with enhanced photodegradation efficiency towards antibiotics and dyes	Journal of photochemistry and photobiology a- chemistry, 399 ,112616 (2020)	Ivan, R; del Pino, AP; Yousef, I; Logofatu, C; Gyorgy, E	3.306	0.453	Q2	Q1
54.	Epitaxial gesn Obtained by High Power Impulse Magnetron Sputtering and the	Acs applied materials & interfaces, 12 , pp.33879- 33886 (2020)	Dascalescu, I; Zoita, NC; Slav, A; Matei, E; Iftimie, S; Comanescu, F; Lepadatu, AM; Palade, C; Lazanu, S; Buca, D;	8.758	1.686	Q1	Q1

	Heterojunction with Embedded GeSn Nanocrystals for Shortwave Infrared Detection		Teodorescu, VS; Ciurea, ML; Braic, M; Stoica, T				
55.	Energy storage performance of ferroelectric ZrO(2)film capacitors: effect of HfO2:Al(2)O(3)diel ectric insert layer	<i>Journal of materials</i> <i>chemistry a</i> , 8 , pp.14171- 14177 (2020)	Silva, JPB; Silva, JMB; Sekhar, KC; Palneedi, H; Istrate, MC; Negrea, RF; Ghica, C; Chahboun, A; Pereira, M; Gomes, MJM	11.301	2.000	Q1	Q1
56.	Polarization Switching and Negative Capacitance in Epitaxial PbZr0.2Ti0.8O3 Thin Films	Physical review applied, 14 ,014080 (2020)	Pintilie, L; Boni, GA; Chirila, C; Hrib, L; Trupina, L; Filip, LD; Pintilie, I	4.194	1.649	Q1	Q2
57.	Transport, AC susceptibility, DC magnetization, and magnetic relaxation studies of YBa2Cu3O7 films with synergetic pinning centers grown by PLD	Modern physics letters b, 34 ,2040060 (2020)	Crisan, A; Ivan, I; Miu, L; Becherscu, N; Dang, VS	1.224	0.146	Q3	Q3
58.	Effects of annealing on the physical properties of ito thin films grown by radio frequency magnetron sputtering	Digest journal of nanomaterials and biostructures, 15 , pp.679- 687 (2020)	Radu, A; Locovei, C; Antohe, VA; Socol, M; Coman, D; Manica, M; Dumitru, A; Dan, L; Radu, C; Raduta, AM; Ion, L; Iftimie, S; Antohe, S	0.785	0.114	Q4	Q3
59.	Photoelectrochemica l water oxidation on hematite films in neutral and alkaline electrolytes	Digest journal of nanomaterials and biostructures, 15 , pp.699- 706 (2020)	Vasile, E; Sima, M; Sima, A	0.785	0.114	Q4	Q3
60.	Thickness influence on the pyroelectric signal of dopped PZT ceramic pellets	Digest journal of nanomaterials and biostructures,15, pp.781- 786 (2020)	Stancu, V; Botea, M; Amarande, L; Pintilie, L	0.785	0.114	Q4	Q3
61.	Oxidation of chalcopyrite in air- equilibrated acidic solution: Inhibition with phenacyl derivatives	Transactions of nonferrous metals society of china, 30 , pp.1928-1942 (2020)	Chirita, P; Duinea, MI; Sarbu, LG; Birsa, LM; Baibarac, M; Sava, F; Matei, E	2.615	0.375	Q1	Q1
62.	VAIPOs as Efficient Catalysts for Glycerol Conversion	Catalysts,10,728 (2020)	Mitran, G; Neatu, F; Neatu, S; Trandafir, MM; Florea, M	3.520	0.585	Q2	Q2

	to Methanol						
63.	Novel Ecogenic Plasmonic Biohybrids as Multifunctional Bioactive Coatings	Coatings,10,659 (2020)	Barbinta-Patrascu, ME; Ungureanu, C; Badea, N; Bacalum, M; Lazea- Stoyanova, A; Zgura, I; Negrila, C; Enculescu, M; Burnei, C	2.436	0.376	Q2	Q2
64.	Mn-Induced Thermal Stability of L1(0)Phase in Fept Magnetic Nanoscale Ribbons	Nanomaterials, 10 ,1278 (2020)	Crisan, AD; Leca, A; Pantelica, D; Dan, I; Crisan, O	4.324	0.671	Q2	Q1
65.	Towards a Correlation between Structural, Magnetic, and Luminescence Properties of CeF3:Tb(3+)Nanocr ystals	Materials, 13 ,2980 (2020)	Bartha, C; Secu, C; Matei, E; Negrila, C; Leca, A; Secu, M	3.057	0.543	Q2	Q1
66.	A sensitive near infrared to near- infrared luminescence nanothermometer based on triple doped Ln -Y2O3	Methods and applications in fluorescence, 8 ,035005 (2020)	Porosnicu, I; Colbea, C; Baiasu, F; Lungu, M; Istrate, MC; Avram, D; Tiseanu, C	2.800	0.669	Q2	Q4
67.	Electron Small Polaron and Magnetic Interactions Direct Anisotropic Growth of Silicon-Doped Hematite Nanocrystals	<i>Crystal growth & design</i> , 20 , pp.4719-4730 (2020)	Allieta, M; Beranova, K; Marelli, M; Coduri, M; Stefan, M; Ghica, D; Morello, G; Malara, F; Naldoni, A	4.089	0.704	Q1	Q1
68.	Image potential states of germanene	2d materials,7,035021 (2020)	Borca, B; Castenmiller, C; Tsvetanova, M; Sotthewes, K; Rudenko, AN; Zandvliet, HJW	7.140	2.439	Q1	Q2
69.	Influence of doping the inorganic cation with Eu or Sb on the properties of perovskite films	<i>Physica scripta</i> , 95 ,075707 (2020)	Stancu, V; Leonat, LN; Tomulescu, AG; Derbali, S; Pintilie, L; Besleaga, C; Galca, AC; Neatu, F; Neatu, T; Florea, M; Pintilie, I	1.985	0.501	Q2	Q2
70.	Synthesis and characterization of a titanium phosphate- tellurite glass for Faraday rotators	Journal of the american ceramic society, 103 , pp.3978-3990 (2020)	Elisa, M; Boroica, L; Sava, BA; Iordache, SM; Iordache, AM; Vasiliu, IC; Stefan, RC; Galca, AC; Kuncser, V; Eftimie, M	3.502	0.671	Q1	Q1
71.	Magnetic and magnetostrictive	Journal of physics and chemistry of	Sofronie, M; Tolea, F; Tolea, M; Popescu, B;	3.442	0.429	Q2	Q1

	properties of the ternary Fe67.5Pd30.5Ga2 ferromagnetic shape memory ribbons	solids, 142 ,109446 (2020)	Valeanu, M				
72.	Robust conductance zeros in graphene quantum dots and other bipartite systems	<i>Physical review b</i> , 101 ,235318 (2020)	Nita, M; Tolea, M; Marinescu, DC	3.575	1.020	Q2	Q1
73.	Reproducibility of small Ge2C6H10O7- added MgB2 bulks fabricated by ex situ Spark Plasma Sintering used in compound bulk magnets with a trapped magnetic field above 5T	Scientific reports, 10 ,10538 (2020)	Badica, P; Aldica, G; Grigoroscuta, MA; Burdusel, M; Pasuk, I; Batalu, D; Berger, K; Koblischka-Veneva, A; Koblischka, MR	3.998	1.263	Q1	Q1
74.	Interface chemistry of pristine TiN/La: Hf 0.5 Zr 0.5 O 2 capacitors	Applied physics letters, 116 , pp (2020)	Hamouda, W; Lubin, C; Ueda, S; Yamashita, Y; Renault, O; Mehmood, F; Mikolajick, T; Schroeder, U; Negrea, R; Barrett, N	3.597	0.883	Q1	Q1
75.	Perovskite ferroelectric thin film as an efficient interface to enhance the photovoltaic characteristics of Si/SnO(x)heterojunc tions	Journal of materials chemistry a, 8 , pp.11314- 11326 (2020)	Silva, JPB; Vieira, EMF; Silva, JMB; Gwozdz, K; Figueiras, FG; Veltruska, K; Matolin, V; Istrate, MC; Ghica, C; Sekhar, KC; Kholkin, AL; Goncalves, LM; Chahboun, A; Pereira, M	11.301	2.000	Q1	Q1
76.	Influence of Reduced Graphene Oxide on the Electropolymerizati on of 5-Amino-1- naphthol and the Interaction of 1,4- Phenylene Diisothiocyanate with the Poly(5- Amino-1- naphtol)/Reduced Graphene Oxide Composite	Polymers, 12 ,1299 (2020)	Baibarac, M; Daescu, M; Socol, M; Bartha, C; Negrila, C; Fejer, SN	3.426	0.546	Q1	Q1
77.	Obtaining and Characterizing Thin Layers of Magnesium Doped Hydroxyapatite by Dip Coating	<i>Coatings</i> , 10 ,510 (2020)	Predoi, D; Iconaru, SL; Predoi, MV; Motelica- Heino, M; Buton, N; Megier, C	2.436	0.376	Q2	Q2

	Procedure						
78.	Highly Active Transition Metal- Promoted CuCeMgAlO Mixed Oxide Catalysts Obtained from Multicationic LDH Precursors for the Total Oxidation of Methane	Catalysts, 10 ,613 (2020)	Al-Aani, HMS; Trandafir, MM; Fechete, I; Leonat, LN; Badea, M; Negrila, C; Popescu, I; Florea, M; Marcu, IC	3.520	0.585	Q2	Q2
79.	Development of Cerium-Doped Hydroxyapatite Coatings with Antimicrobial Properties for Biomedical Applications	Coatings, 10 ,516 (2020)	Predoi, D; Iconaru, SL; Predoi, MV; Groza, A; Gaiaschi, S; Rokosz, K; Raaen, S; Negrila, CC; Prodan, AM; Costescu, A; Badea, ML; Chapon, P	2.436	0.376	Q2	Q2
80.	Strategy for Modifying Layered Perovskites toward Efficient Solar Light-Driven Photocatalysts for Removal of Chlorinated Pollutants	Catalysts, 10 ,637 (2020)	Raciulete, M; Papa, F; Negrila, C; Bratan, V; Munteanu, C; Pandele- Cusu, J; Culita, DC; Atkinson, I; Balint, I	3.520	0.585	Q2	Q2
81.	Assessment of Potential of the High-Voltage Anodic Plasma Source to Deposit Multilayer Structures Relevant to X-ray Mirror Applications	<i>Coatings</i> , 10 ,531 (2020)	Vlaicu, AM; Anghel, A; Badulescu, M; Surdu- Bob, C	2.436	0.376	Q2	Q2
82.	Effect of the processing parameters on surface, physico- chemical and mechanical features of bioceramics synthesized from abundant carp fish bones	Ceramics international,46, pp.10159-10171 (2020)	Maidaniuc, A; Miculescu, F; Ciocoiu, RC; Butte, TM; Pasuk, I; Stan, GE; Voicu, SI; Ciocan, LT	3.830	0.479	Q1	Q1
83.	Multidisciplinary characterization of melanin pigments from the black fungus Cryomyces antarcticus	Applied microbiology and biotechnology, 104 , pp.6385-6395 (2020)	Pacelli, C; Cassaro, A; Maturilli, A; Timperio, AM; Gevi, F; Cavalazzi, B; Stefan, M; Ghica, D; Onofri, S	3.530	0.826	Q2	Q1

84.	Humidity-Tolerant Ultrathin NiO Gas- Sensing Films	Acs sensors,5, pp.1389- 1397 (2020)	Wilson, RL; Simion, CE; Stanoiu, A; Taylor, A; Guldin, S; Covington, JA; Carmalt, CJ; Blackman, CS	7.333	1.659	Q1	Q2
85.	Optimization of magnetic fluid hyperthermia with respect to nanoparticle shape- related parameters: case of magnetite ellipsoidal nanoparticles	Journal of nanoparticle research, 22 ,138 (2020)	Iacob, N; Kuncser, A; Comanescu, C; Palade, P; Kuncser, V	2.132	0.373	Q3	Q1
86.	Highly Efficient Ultralow Pd Loading Supported on MAX Phases for Chemoselective Hydrogenation	Acs catalysis, 10 , pp.5899- 5908 (2020)	Trandafir, MM; Neatu, F; Chirica, IM; Neatu, S; Kuncser, AC; Cucolea, EI; Natu, V; Barsoum, MW; Florea, M	12.350	3.005	Q1	Q1
87.	Nonisocyanate Poly(Hydroxyl Urethane)-Based Green Polymer Hybrid Coating Systems: Tailoring of Biomacromolecular Compound Architecture Using APTMS- ZnO/TEMPO- Oxidized Cellulose Nanoparticles	<i>Acs omega</i> , 5 , pp.10315-10326 (2020)	Haniffa, MAM; Illias, HA; Chee, CY; Ibrahim, S; Sandu, V; Chuah, CH	2.870	0.574	Q2	Q2
88.	Electron paramagnetic resonance and microstructural insights into the thermal behavior of simonkolleite nanoplatelets	Physical chemistry chemical physics, 22 , pp.9503-9512 (2020)	Rostas, AM; Kuncser, AC; Ghica, D; Palici, A; Maraloiu, VA; Vlaicu, ID	3.430	0.855	Q1	Q1
89.	Depletion induced depolarization field in Hf1-xZrxO2 metal-ferroelectric- semiconductor capacitors on germanium	Applied physics letters, 116 , pp (2020)	Zacharaki, C; Tsipas, P; Chaitoglou, S; Evangelou, EK; Istrate, CM; Pintilie, L; Dimoulas, A	3.597	0.883	Q1	Q1
90.	Enhanced critical current density at high magnetic fields in mgb2 with Ga/In acetylacetonate	Journal of materials research and technology- jmr&t,9, pp.3724-3733 (2020)	Batalu, D; Aldica, G; Burdusel, M; Grigoroscuta, M; Pasuk, I; Kuncser, A; Ionescu, AM; Badica, P	5.289	0.791	Q1	Q2

	1		1	1	1	1	1
	processed by spark plasma sintering						
91.	Optical Properties of Composites Based on Graphene Oxide and Polystyrene	Molecules, 25 ,2419 (2020)	Stroe, M; Cristea, M; Matei, E; Galatanu, A; Cotet, LC; Pop, LC; Baia, M; Danciu, V; Anghel, I; Baia, L; Baibarac, MA	3.267	0.601	Q2	Q1
92.	Influence of boric acid concentration on the properties of electrodeposited CZTS absorber layers	<i>Physica scripta</i> , 95 ,054001 (2020)	Zaki, MY; Nouneh, K; Touhami, ME; Matei, E; Badica, P; Burdusel, M; Negrila, CC; Baibarac, M; Pintilie, L; Galca, AC	1.985	0.501	Q2	Q2
93.	CeO2:Mn3O4 Catalytic Micro- Converters Tuned for CH4 Detection Based on Catalytic Combustion under Real Operating Conditions	Materials, 13 ,2196 (2020)	Simion, CE; Florea, OG; Florea, M; Neatu, F; Neatu, S; Trandafir, MM; Stanoiu, A	3.057	0.543	Q2	Q1
94.	High-temperature strength of boron carbide with Pt grain-boundary framework in situ synthesized during spark plasma sintering	Ceramics international,46, pp.9136-9144 (2020)	Vasylkiv, O; Demirskyi, D; Borodianska, H; Kuncser, A; Badica, P	3.830	0.479	Q1	Q1
95.	Estimation of the pyroelectric coefficient for ceramic Pb(Zr,Ti)O- 3 samples: Comparison of the results obtained by two easy to implement methods	Infrared physics & technology, 106 ,103269 (2020)	Pintilie, L; Iuga, A; Stancu, V; Botea, M	2.379	0.355	Q2	Q2
96.	Obtaining sige nanocrystallites between crystalline TiO2 layers by HiPIMS without annealing	Applied surface science, 511 ,145552 (2020)	Sultan, MT; Gudmundsson, JT; Manolescu, A; Teodorescu, VS; Ciurea, ML; Svavarsson, HG	6.182	0.773	Q1	Q1
97.	Structural distortion dependence of thermoelectric properties in CoFeZrSi Heusler material	Journal of alloys and compounds, 821 ,153492 (2020)	Birsan, A	4.650	0.630	Q1	Q1
98.	Crystal and magnetic structures, magnetic and	Journal of alloys and compounds, 821 ,153412 (2020)	Turchenko, V; Kostishyn, VG; Trukhanov, S; Damay, F; Porcher, F;	4.650	0.630	Q1	Q1

ferroelectric properties of strontium ferr partially subst with in ions	te ituted	Balasoiu, M; Lupu, N; Bozzo, B; Fina, I; Trukhanov, A; Waliszewski, J; Recko, K; Polosan, S				
99. Undoped SnO Support for N Species to Bo Oxygen Gene through Alkal Water Electro	2 as a Acs applied materials & interfaces, 12 , pp.18407- 18420 (2020) ration ine lysis	Neatu, S; Neatu, F; Diculescu, VC; Trandafir, MM; Petrea, N; Somacescu, S; Krumeich, F; Wennmacher, JTC; Knorpp, AJ; van Bokhoven, JA; Florea, M	8.758	1.686	Q1	Q1
100. Carbon-based nanomaterials ZnO ternary compound lay grown by lase technique for environmental energy storage applications	Applied surface science, 509 ,145359 (2020) ers	Ivan, R; Popescu, C; del Pino, AP; Logofatu, C; Gyorgy, E	6.182	0.773	Q1	Q1
101. Effect of ITO electrode patte on the propert organic heterostructur based on non- fullerene acce prepared by M	erning ies of es ptor IAPLE	Stanculescu, A; Breazu, C; Socol, M; Rasoga, O; Preda, N; Petre, G; Solonaru, AM; Grigoras, M; Stanculescu, F; Socol, G; Popescu-Pelin, G; Girtan, M	6.182	0.773	Q1	Q1
102. Pulsed Laser Deposition Fil Based on cdse Doped Zinc Aluminophos Glass	Jom,, pp () - ohate	Elisa, M; Iordache, SM; Iordache, AM; Rusu, MI; Socol, G; Filipescu, M; Bartha, C; Enculescu, M	2.029	0.601	Q2	Q1
103. Quantum turn regime of nanoelectrome cal systems	stile <i>Physical review</i> b, 101 ,165409 (2020)	Dragomir, R; Moldoveanu, V; Stanciu, S; Tanatar, B	3.575	1.020	Q2	Q1
104. UV Light Effe Cationic Photopolymer of the SU8 Photoresist an Composites w Carbon Nanot New Evidence Shown by Photoluminese Studies	ect on <i>Journal of physical</i> <i>chemistry c</i> , 124 , pp.7467- ization 7476 (2020) d Its ith ubes: cence	Baibarac, M; Radu, A; Cristea, M; Cercel, R; Smaranda, I	4.189	0.963	Q2	Q1
105. Electron-polar dichotomy of carriers in	on Communications charge physics, 3 ,62 (2020)	Husanu, MA; Vistoli, L; Verdi, C; Sander, A; Garcia, V; Rault, J; Bisti,	4.684	1.962	Q1	Q4

	perovskite oxides		F; Lev, LL; Schmitt, T; Giustino, F; Mishchenko, AS; Bibes, M; Strocov, VN				
106.	Lead-Free BNT- BT0.08/CoFe2O4 Core-Shell Nanostructures with Potential Multifunctional Applications	Nanomaterials, 10 ,672 (2020)	Cernea, M; Radu, R; Amorin, H; Greculeasa, SG; Vasile, BS; Surdu, VA; Ganea, P; Trusca, R; Hattab, M; Galassi, C	4.324	0.671	Q2	Q1
107.	Curcumin Incorporation into Zn3Al Layered Double Hydroxides- Preparation, Characterization and Curcumin Release	Crystals, 10 ,244 (2020)	Pavel, OD; Serban, A; Zavoianu, R; Bacalum, E; Birjega, R	2.404	0.476	Q2	Q2
108.	ZnO nanostructures grown on ITO coated glass substrate by hybrid microwave-assisted hydrothermal method	<i>Optik</i> , 208 ,164372 (2020)	Filip, A; Musat, V; Tigau, N; Polosan, S; Pimentel, A; Ferreira, S; Gomes, D; Calmeiro, T; Martins, R; Fortunato, E	2.187	0.213	Q2	Q1
109.	Magnetic and ferroelectric properties, crystal and magnetic structures of SrFe11.9In0.1O19	<i>Physica scripta</i> , 95 ,044006 (2020)	Turchenko, VA; Trukhanov, A; Trukhanov, S; Damay, F; Porcher, F; Balasoiu, M; Lupu, N; Chiriac, H; Bozzo, B; Fina, I; Waliszewski, J; Kostishyn, VG; Recko, K; Polosan, S	1.985	0.501	Q2	Q2
110.	Detailed Molecular and Structural Analysis of Dual Emitter IrQ(ppy)(2) Complex	Materials, 13 ,1617 (2020)	Ciobotaru, IC; Crisan, DN; Sket, P; Ciobotaru, CC; Polosan, S	3.057	0.543	Q2	Q1
111.	Exploring the effect of aliovalent substitution of Pb2+ by Eu3+ on structural, morphological and optical properties of CH3NH3PbI3 perovskite films	<i>Physica scripta</i> , 95 ,044003 (2020)	Derbali, S; Nouneh, K; Florea, M; Neatu, F; Neatu, S; Leonat, LN; Secu, M; Tomulescu, AG; Stancu, V; Pintilie, L; Touhami, ME; Galca, AC	1.985	0.501	Q2	Q2
112.	High magnetic shielding properties of an MgB2 cup obtained by machining a spark-	Superconductor science & technology, 33 ,044018 (2020)	Gozzelino, L; Gerbaldo, R; Ghigo, G; Torsello, D; Bonino, V; Truccato, M; Grigoroscuta, MA; Burdusel, M; Aldica, GV;	3.067	0.882	Q2	Q2

	plasma-sintered bulk cylinder		Sandu, V; Pasuk, I; Badica, P				
113.	Radiation damage in p-type EPI silicon pad diodes irradiated with protons and neutrons	Nuclear instruments & methods in physics research section a- accelerators spectrometers detectors and associated equipment, 958 ,162221 (2020)	Gurimskaya, Y; de Almeida, PD; Garcia, MF; Suau, IM; Moll, M; Fretwurst, E; Makarenko, L; Pintilie, I	1.265	0.377	Q3	Q1
114.	Low temperature CO sensing under infield conditions with in doped Pd/SnO2	Sensors and actuators b- chemical, 308 ,127717 (2020)	Stanoiu, A; Ghica, C; Somacescu, S; Kuncser, AC; Vlaicu, AM; Mercioniu, IF; Florea, OG; Simion, CE	7.100	0.983	Q1	Q1
115.	Surface states mediated charge transfer in redox behavior of hemin at GaAs(100) electrodes	<i>Rsc advances</i> , 10 , pp.12318-12325 (2020)	Enache, M; Negrila, C; Lazarescu, V	3.119	0.516	Q2	Q1
116.	Investigation of Ba0.6Sr0.4TiO3 thick films by means of a novel THz-TDS approach	Applied surface science, 506 ,144807 (2020)	Nedelcu, L; Annino, G; Chirila, C; Trupina, L; Galca, AC; Banciu, MG	6.182	0.773	Q1	Q1
117.	Unexpected magneto- functionalities of amorphous Fe-Gd thin films crossing the magnetization compensation point	Journal of magnetism and magnetic materials, 498 ,166173 (2020)	Stanciu, AE; Schinteie, G; Kuncser, A; Iacob, N; Trupina, L; Ionita, I; Crisan, O; Kuncser, V	2.717	0.429	Q2	Q1
118.	Polarization- dependent magnetism of the Ni/BaTiO3 interface	<i>Physical review</i> <i>materials</i> , 4 ,034402 (2020)	Bocirnea, AE; Popescu, DG; Chirila, C; Costescu, RM; Kuncser, V; Stancu, V; Trupina, L; Pasuk, I; Vlaicu, AM; Husanu, MA	3.337	1.157	Q2	Q2
119.	On the Physical Properties PEDOT:PSS Thin Films	Materials today communications, 22 ,100735 (2020)	Girtan, M; Mallet, R; Socol, M; Stanculescu, A	2.678	Not Availa ble	Q2	Q3
120.	Optical spectroscopy and dielectric properties of phosphate- tellurite glasses	<i>Physica scripta</i> , 95 ,034005 (2020)	Polosan, S; Nitescu, A; Secu, M	1.985	0.501	Q2	Q2
121.	Mesoporous Cobalt Ferrite Nanosystems Obtained by Surfactant-Assisted Hydrothermal Method: Tuning Morpho-structural	Nanomaterials, 10 ,476 (2020)	Palade, P; Comanescu, C; Kuncser, A; Berger, D; Matei, C; Iacob, N; Kuncser, V	4.324	0.671	Q2	Q1

	and Magnetic Properties via pH- Variation						
12	2. Thin Films Based on Cobalt Phthalocyanine:C60 Fullerene:ZnO Hybrid Nanocomposite Obtained by Laser Evaporation	Nanomaterials, 10 ,468 (2020)	Socol, M; Preda, N; Costas, A; Borca, B; Popescu-Pelin, G; Mihailescu, A; Socol, G; Stanculescu, A	4.324	0.671	Q2	Q1
12	3. Long-Term Evaluation of Dip- Coated PCL-Blend- PEG Coatings in Simulated Conditions	Polymers, 12 ,717 (2020)	Visan, AI; Popescu-Pelin, G; Gherasim, O; Mihailescu, A; Socol, M; Zgura, I; Chiritoiu, M; Sima, LE; Antohe, F; Ivan, L; Vranceanu, DM; Cotrut, CM; Cristescu, R; Socol, G	3.426	0.546	Q1	Q1
12	4. Organometallic Coatings for Electroluminescence Applications	<i>Coatings</i> , 10 ,277 (2020)	Polosan, S; Ciobotaru, IC; Ciobotaru, CC	2.436	0.376	Q2	Q2
12	5. Sol-Gel Processing of Bismuth Germanate Thin- Films	<i>Coatings</i> , 10 ,255 (2020)	Secu, M; Secu, CE; Tite, T; Polosan, S	2.436	0.376	Q2	Q2
12	6. (Ba,Sr)TiO3 solid solutions sintered from sol-gel derived powders: An insight into the composition and temperature dependent dielectric behavior	Ceramics international,46, pp.4180-4190 (2020)	Patru, RE; Ganea, CP; Stanciu, CA; Surdu, VA; Trusca, R; Ianculescu, AC; Pintilie, I; Pintilie, L	3.830	0.479	Q1	Q1
12	7. PVDF-ferrite composites with dual magneto- piezoelectric response for flexible electronics applications: synthesis and functional properties	Journal of materials science, 55 , pp.3926-3939 (2020)	Gheorghiu, F; Stanculescu, R; Curecheriu, L; Brunengo, E; Stagnaro, P; Tiron, V; Postolache, P; Buscaglia, MT; Mitoseriu, L	3.553	0.565	Q2	Q1
12	8. SiGe nanocrystals in SiO2 with high photosensitivity from visible to short-wave infrared	Scientific reports,10,3252 (2020)	Stavarache, I; Logofatu, C; Sultan, MT; Manolescu, A; Svavarsson, HG; Teodorescu, VS; Ciurea, ML	3.998	1.263	Q1	Q1
12	9. Quantum dot exciton dephasing by Coulomb	<i>Physical review</i> <i>b</i> , 101 ,085304 (2020)	Dinu, IV; Tolea, M; Gartner, P	3.575	1.020	Q2	Q1

	interaction: A fermionic analog of the independent boson model						
130.	Controlling Single Molecule Conductance by a Locally Induced Chemical Reaction on Individual Thiophene Units	Angewandte chemie- international edition, 59 , pp.6207-6212 (2020)	Michnowicz, T; Borca, B; Petuya, R; Schendel, V; Pristl, M; Pentegov, I; Kraft, U; Klauk, H; Wahl, P; Mutombo, P; Jelinek, P; Arnau, A; Schlickum, U; Kern, K	12.959	3.303	Q1	Q1
131.	Hybrid nanoelectronic- magnetic device with magnetoresistive core-shell Fe/FeC nanoparticles	Applied physics a-materials science & processing, 126 , pp (2020)	Crisan, O; Crisan, AD; Dumitrache, F; Luculescu, C	1.810	0.279	Q3	Q1
132.	Simple Ethanol Refluxing Method for Production of Blue-Colored Titanium Dioxide with Oxygen Vacancies and Visible Light- Driven Photocatalytic Properties	Journal of physical chemistry c, 124 , pp.3564- 3576 (2020)	Lettieri, S; Gargiulo, V; Alfe, M; Amati, M; Zeller, P; Maraloiu, VA; Borbone, F; Pavone, M; Munoz-Garcia, AB; Maddalena, P	4.189	0.963	Q2	Q1
133.	Low power non- volatile memory switching in monolayer-rich 2D WS2 and MoS2 devices	<i>Aip advances</i> , 10 ,025102 (2020)	Mihai, C; Sava, F; Galca, AC; Velea, A	1.337	0.381	Q3	Q1
134.	Aminopropyl-silica functionalized with halogen-reactive compounds for antimicrobial applications	<i>Materials chemistry and physics</i> , 241 ,122353 (2020)	Zarafu, I; Al Taweel, AAJ; Limban, C; Popa, M; Marutescu, L; Chifiriuc, MC; Pircalabioru, GG; Culita, D; Ghica, C; Ionita, P	3.408	0.452	Q2	Q1
135.	Electrospun conductive gold covered polycaprolactone fibers as electrochemical sensors for O-2 monitoring in cell culture media	Electrochemistry communications, 111 ,10666 2 (2020)	Serban, A; Evanghelidis, A; Onea, M; Diculescu, V; Enculescu, I; Barsan, MM	4.333	0.923	Q2	Q1
136.	Crown-ether functionalized graphene oxide for	Materials research bulletin, 122 ,110643 (2020)	Petrescu, S; Avramescu, S; Musuc, AM; Neatu, F; Florea, M; Ionita, P	4.019	0.463	Q2	Q1

	metal ions sequestration						
137.	Magnetic properties and thermal stability of polyvinylidene fluoride-Fe2O3 nanocomposites	Journal of materials research, 35 , pp.132-140 (2020)	Kuncser, V; Chipara, D; Martirosyan, KS; Schinteie, GA; Ibrahim, E; Chipara, M	2.502	0.481	Q3	Q1
138.	Synthesis and characterization of antibacterial drug loaded beta- tricalcium phosphate powders for bone engineering applications	Journal of materials science-materials in medicine, 31 ,16 (2020)	Topsakal, A; Ekren, N; Kilic, O; Oktar, FN; Mahirogullari, M; Ozkan, O; Sasmazel, HT; Turk, M; Bogdan, IM; Stan, GE; Gunduz, O	2.489	0.502	Q2	Q1
139.	Beneficial effects of a WC addition in FAST-densified tungsten	Materials science and engineering a-structural materials properties microstructure and processing,772,138666 (2020)	Novak, S; Kocen, M; Zavagnik, AS; Galatanu, A; Galatanu, M; Tarancon, S; Tejado, E; Pastor, JY; Jenus, P	4.652	0.805	Q1	Q1
140.	Biomorphic 3D fibrous networks based on ZnO, CuO and ZnO-CuO composite nanostructures prepared from eggshell membranes	<i>Materials chemistry and physics</i> , 240 ,122205 (2020)	Preda, N; Costas, A; Enculescu, M; Enculescu, I	3.408	0.452	Q2	Q1
141.	Third-order optical nonlinearity properties of CdCl2- modifed Ge-Sb-S chalcogenide glasses	Journal of non-crystalline solids, 528 ,119757 (2020)	Lu, XS; Li, JH; Yang, L; Zhang, RN; Zhang, YD; Ren, J; Galca, AC; Secu, M; Farrell, G; Wang, PF	2.929	0.440	Q1	Q1
142.	Magnetic Fe@Y Composites as Efficient Recoverable Catalysts for the Valorization of the Recalcitrant Marine Sulfated Polysaccharide Ulvan	Acs sustainable chemistry & engineering.8, pp.319- 328 (2020)	Prech, J; Ioannou, E; Roussis, V; Kuncser, V; Podolean, I; Coman, SM; Valtchev, V; Parvulescu, VI	7.632	1.301	Q1	Q1
143.	Insight on spectral, thermal and biological behaviour of some Cu(II) complexes with saturated pentaazamacrocyclic ligands bearing amino acid residues	Journal of thermal analysis and calorimetry,, pp ()	Patrascu, E; Badea, M; Korosin, NC; Korosec, RC; Ruta, LL; Farcasanu, IC; Grecu, MN; Guillaumet, G; Olar, R	2.731	0.291	Q2	Q1

144.	Resistance hysteresis correlated with synchrotron radiation surface studies in atomic sp(2) layers of carbon synthesized on ferroelectric (001) lead zirconate titanate in an ultrahigh vacuum	<i>Rsc advances</i> , 10 , pp.1522- 1534 (2020)	Apostol, NG; Lizzit, D; Lungu, GA; Lacovig, P; Chirila, CF; Pintilie, L; Lizzit, S; Teodorescu, CM	3.119	0.516	Q2	Q1
145.	Spectroscopic investigations on PVDF-Fe2O3 nanocomposites	Journal of applied polymer science, 137 ,48907 (2020)	Chipara, D; Kuncser, V; Lozano, K; Alcoutlabi, M; Ibrahim, E; Chipara, M	2.520	0.331	Q2	Q1
146.	Multifunctional Hydroxyapatite Coated with Arthemisia absinthium Composites	Molecules, 25 ,413 (2020)	Raita, MS; Iconaru, SL; Groza, A; Cimpeanu, C; Predoi, G; Ghegoiu, L; Badea, ML; Chifiriuc, MC; Marutescu, L; Trusca, R; Furnaris, CF; Turculet, CS; Enache, DV; Predoi, D	3.267	0.601	Q2	Q1
147.	Modular High- Intensity Monochromatic In Situ Illumination Set-Up for Investigating ESR Photoactive Centers in Semiconductors	Applied magnetic resonance, 51 , pp.287-296 (2020)	Nistor, SV; Joita, AC	0.864	0.182	Q4	Q3
148.	Deposition and characterization of thin films based on nanostructured WO3 as sensorial elements for detection o f H2S	Revista romana de materiale-romanian journal of materials, 50 , pp.387-394 (2020)	Sobetkii, A; Olaru, MT; Cindemir, U; Osterlund, L; Stanoiu, A; Simion, CE; Bejan, SE; Irimescu, RE	0.542	0.039	Q4	Q4
149.	Therapeutic Use of Inorganic Nanomaterials in Malignant Diseases	Environmental nanotechnology, vol 3,27, pp.47-87 (2020)	Lupu, AR; Popescu, T; Stojanovic, M	Not available	Not availa ble	Not availabl e	Not availa ble
150.	Microwave investigation of pinning in Te- and cubic-BN- added MgB2	14th european conference on applied superconductivity (eucas2019), 1559 ,012039 (2020)	Alimenti, A; Torokhtii, K; Grigoroscuta, M; Badica, P; Crisan, A; Silva, E; Pompeo, N	Not available	Not availa ble	Not availabl e	Not availa ble
151.	Investigation of flux jumps during pulsed field magnetization in graphene-added MgB2 bulks	14th european conference on applied superconductivity (eucas2019), 1559 ,012080 (2020)	Yokoyama, K; Oka, T; Berger, K; Dorget, R; Koblischka, M; Grigoroscuta, M; Burdusel, M; Batalu, D; Aldica, G; Badica, P;	Not available	Not availa ble	Not availabl e	Not availa ble

			Sakai, N; Muralidhar, M; Murakami, M				
152.	Nanostructures based detection of pharmaceuticals and other contaminants of emerging concern	Advanced nanostructures for environmental health,, pp.75-114 (2020)	Baibarac, M; Toulbe, N	Not available	Not availa ble	Not availabl e	Not availa ble
153.	Analog IGZO Memristor With Extended Capabilities	<i>Ieee journal of the electron devices society</i> , 8 , pp.695-700 (2020)	Dumitru, V; Besleaga, C; Ionescu, ON	2.555	0.672	Q2	Q3
154.	Effect of mn substitution on the structural, magnetic and magnetostrictive properties of Fe-Pd ferromagnetic shape memory ribbons	Romanian reports in physics, 72 ,502 (2020)	Sofronie, M; Enculescu, M; Crisan, AD; Tolea, F	2.147	0.269	Q2	Q3
155.	The Influence of Synthesis Parameters on Structural and Magnetic Properties of Iron Oxide Nanomaterials	Nanomaterials, 10 ,85 (2020)	Cursaru, LM; Piticescu, RM; Dragut, DV; Tudor, IA; Kuncser, V; Iacob, N; Stoiciu, F	4.324	0.671	Q2	Q1
156.	Cytotoxicity, Antioxidant, Antibacterial, and Photocatalytic Activities of ZnO- CdS Powders	Materials, 13 ,182 (2020)	Zgura, I; Preda, N; Enculescu, M; Diamandescu, L; Negrila, C; Bacalum, M; Ungureanu, C; Barbinta- Patrascu, ME	3.057	0.543	Q2	Q1
157.	Dextran-Thyme Magnesium-Doped Hydroxyapatite Composite Antimicrobial Coatings	Coatings,10,57 (2020)	Iconaru, SL; Predoi, MV; Motelica-Heino, M; Predoi, D; Buton, N; Megier, C; Stan, GE	2.436	0.376	Q2	Q2
158.	Silver-Doped Hydroxyapatite Thin Layers Obtained by Sol-Gel Spin Coating Procedure	Coatings,10,14 (2020)	Prodan, AM; Iconaru, SL; Predoi, MV; Predoi, D; Motelica-Heino, M; Turculet, CS; Beuran, M	2.436	0.376	Q2	Q2
159.	Soft-magnetic coatings as possible sensors for magnetic imaging of superconductors	Superconductor science & technology, 33 ,015002 (2020)	Ionescu, AM; Simmendinger, J; Bihler, M; Miksch, C; Fischer, P; Soltan, S; Schutz, G; Albrecht, J	3.067	0.882	Q2	Q2
160.	Synthesis and characterization of conducting aniline and o-anisidine nanocomposites based on	<i>Applied clay</i> <i>science</i> , 184 ,105395 (2020)	Kenane, A; Galca, AC; Matei, E; Yahiaoui, A; Hachemaoui, A; Benkouider, AM; Bartha, C; Istrate, MC; Galatanu, M; Rasoga, O;	4.605	0.649	Q1	Q1

montmorillonite	Stanculescu, A		
modified clay			

<u>4.2.2. Lucrări/comunicări științifice la manifestări științifice (conferințe, seminarii, worksopuri, etc):</u>

Nr. Crt.	Titlu prezentare	Autori	Detalii eveniment	Tip prezentare
1	Microstructure and dielectric	E. Dimitriu, M.	Electroceramics XVII, ONLINE	Poster
	properties of non-	Cernea,	Conference, 24-28 August 2020,	
	stoichiometric lead		Darmstadt-Germany. Book of	
	(Pb Sr)(7r Sb)(Ti Mn)O3		XVII Conference p 260:	
	(10,57)(27,50)(11,100)(5)		X VII Conference, p. 200,	
2	Methane Combustion Using	O.G. Florea, A.	3rd International Conference on	Prezentare orala
	Pd Deposited on CeOx-	Stănoiu, M.	Emerging Technologies in	
	MnOx/La-Al2O3 Pellistors	Gheorghe, C.	Materials Engineering,	
		Cobianu, F.	EmergeMAT, 29-30 October	
		Neațu, M.M.	2020, Bucharest, Romania, 78,	
		Trandafir, Ş.	ISSN 2602-0424	
		Neațu, M. Florea,		
2		C.E. Simion		D
3	Dopant distribution	D. Ghica, M.	20th International Conference	Poster
	engineering in ZnO:Mn	Ştefan, I. D.	Materiala ICDIM 2020 22 27	
	nanocrysiuis	viaicu	November 2020, Eederal	
			University of Sergine Brazil	
4	Spatial distribution of the	M. Stefan, D.	20th International Conference	Poster
	Mn^{2+} ions in nanostructured	Ghica, C. Ghica,	on Defects in Insulating	
	ZnO films	V. A. Mărăloiu,	Materials –ICDIM 2020, 23-27	
	0	G. E. Stan, R.	November 2020, Federal	
		Plugaru	University of Sergipe, Brazil	
5	Adsorption, wicking behavior	L. Frunză, V. F.	The International Conference	Prezentare orala
	and photodegradation tests of	Cotorobai, M.	"ADVANCED TOPICS IN	
	Rhodamine B solution upon	Enculescu, I.	OPTOELECTRONICS	
	wool substrates	Zgura, C. P.	MICROELECTRONICS AND	
		Ganea	ATOM N 2020 20-23 August	
			2020 Maritime University of	
			Constanta, Romania	
6	The impact of nanowire	M. L. Onea, E.	71st Annual Meeting of the	Poster
	geometry over the electric	Matei, I.	International Society of	
	properties of ZnO nanowires	Enculescu	Electrochemistry online, 31	
_	based devices		August – 1 Septembrie 2020	
7	Flexible Sensors For	R. J. B. Leote, A.	/lst Annual Meeting of the	Prezentare orala
	Biomarker Determination In	Aldea, V. C.	Floatrochomistry Polarada	
	Sweut	Evanghelidis E	Online 30 August 4	
		Matei. I.	September 2020	
		Enculescu	September 2020.	
8	Joining of W to Eurofer by	M. Sanchez, J. de	31 st edition of the Symposium	Poster
	electric field assisted	Prado, I.	on Fusion Technology (SOFT	
	sintering technique	Izaguirre, A.	2020), 20th to 25th September	
		Galatanu, A.	2020 Online	
		Ureña		

9	Recent Results Regarding the Fundamental Properties of Epitaxial PZT Ferroelectrics	L. Pintilie, G. A. Boni, L. D. Filip, C. Chirilă, L. Hrib, V. Stancu, R. Negrea, C. Istrate, L. Trupină, I. Paşuk, I. Pintilie	Joint conference of the IEEE International Frequency Control Symposium and IEEE International Symposium on Applications of Ferroelectrics. On-line, July 2020	Prezentare orala
10	Permittivity, polarization switching and negative capacitance in epitaxial PZT ferroelectrics	L. Pintilie, G. A. Boni, L. D. Filip, C. Chirilă, L. Hrib, R. Negrea, C. Istrate, L. Trupină, I. Paşuk, I. Pintilie	Electroceramics XVII. On-Line, August 2020	Prezentare orala
11	<i>Electric properties of</i> <i>Hf</i> _{0.5} <i>Zr</i> _{0.5} <i>O</i> ₂ <i>ferroelectric films</i> <i>deposited on p and n type Ge</i>	L. Pintilie, G. A. Boni, C. M. Istrate, C. Zacharaki, P. Tsipas, S. Chaitoglou, E. K. Evangelou, A. Dimoulas	Electroceramics XVII. On-Line, August 2020	Prezentare orala
12	Sol-gel derived BST ceramics with fine-tuned dielectric properties based on the Sr content	R. Pătru	Electroceramics XVII. On-Line, August 2020	Prezentare orala
13	Scurtă introducere asupra stadiului de dezvoltare a proiectului component 1	T. Popescu	Workshop 58PCCDI, 19 mai 2020. On-line.	Prezentare orala
14	Influența pH-ului și condițiilor de tratament termic asupra activității de fotogenerare de ROS și citocompatibilității nanoparticulelor de TiO2	M. C. Ilaş, T. Popescu, I.D. Vlaicu, V.A. Mărăloiu, C. Bartha, A.M. Rostaş	Workshop 58PCCDI, 19 mai 2020. On-line.	Prezentare orala
15	Materiale nanocompozite de tip oxid de fier/TiO2 cu proprietăți de încălzire inductivă și fotogenerare de ROS pentru aplicații antitumorale	M. C. Ilaş, T. Popescu, V.A. Mărăloiu, A.M. Rostaş, L. Diamandescu, N. Iacob, A.R. Lupu, I.D. Vlaicu	Workshop 58PCCDI, 19 mai 2020. On-line.	Prezentare orala
16	Influența surfactanților PVP și SHMTP asupra caracteristicilor morfo- structurale, dopării cu ioni Mn2+ și citocompatibilității in vitro în cazul nanoparticulelor de ZnO	I. D. Vlaicu, T. Popescu, A.C. Kuncser, C. O. Matei, M. Ștefan, D. Ghica, D.C. Culita	Workshop 58PCCDI, 19 mai 2020. On-line.	Prezentare orala
17	Nanoparticule magnetice și clusteri magnetici cu morfologie și funcționalitate controlată	I. Crăciunescu, A. Nan, A. Bunge, S. Porav, T. Radu, F. Nekvapil, R.	Workshop 58PCCDI, 19 mai 2020. On-line.	Prezentare orala

		Turcu, , P. Palade, N. Iacob, V. Kuncser		
18	Scurtă introducere asupra stadiului de dezvoltare a proiectului component 2	G. Stan	Workshop 58PCCDI, 19 mai 2020. On-line.	Prezentare orala
19	Dezvoltarea de biomateriale feromagnetice cu memoria formei pe bază de aliaje FePd pentru aplicații biomedicale	M. Sofronie, M. Văleanu, M. Enculescu, F. Țolea, B. Popescu, A. Nan, I. Crăciunescu, A. Bunge, R. Turcu, V.L. Călin, M.G. Moisescu, G. Ion, A. Chiriac, M. David, M. Florescu	Workshop 58PCCDI, 19 mai 2020. On-line.	Prezentare orala
20	Caracterizarea fizico-chimică și testarea biologică in vitro a nanopulberilor de hidroxiapatită substituite cu Ce, Mg, Sr și Zn (0.5 – 10 at.%) – Partea I / Physico- chemical characterization and in vitro biological testing of Ce, Mg, Sr and Zn (0.5 – 10 at.%) substituted hydroxyapatite nanopowders – Part I	T. Tite, I.M. Chirică, S. Iconaru, D. Predoi, A.C. Popa, I. Pasuk, M. Enculescu, C. Dima, C. Mihalcea, A.C. Kuncser, L. Albulescu, A.M. Enciu, C. Tănase, N. Rusu, S. Niţă, B. Nan, J.M.F. Ferreira, G.E. Stan	Workshop 58PCCDI, 19 mai 2020. On-line.	Prezentare orala
21	Caracterizarea fizico-chimică și testarea biologică in vitro a nanopulberilor de hidroxiapatită substituite cu Ce, Mg, Sr și Zn (0.5 – 10 at.%) – Partea a II-a / Physico-chemical characterization and in vitro biological testing of Ce, Mg, Sr and Zn (0.5 – 10 at.%) substituted hydroxyapatite nanopowders – Part II	A. M. Enciu, I. M. Chirică, T. Tite, A. C. Popa, G. E. Stan, L. Albulescu, M. Dudău, C. Tănase	Workshop 58PCCDI, 19 mai 2020. On-line.	Prezentare orala
22	Rezultate privind studiile antimicrobiene ale probelor pe bază de hidroxiapatită dopată cu magneziu	S. L. Iconaru, D. Predoi, S. C. Ciobanu	Workshop 58PCCDI, 19 mai 2020. On-line.	Prezentare orala
23	Ceramici compozite din titanat de bariu și hidroxiapatită cu proprietăți piezoelectrice pentru aplicații în regenerarea țesutului osos	L. Amarande, G.E. Stan, C.F. Miclea, M. Cioangher, L. Trupină, I. Pasuk, E. Matei, L.	Workshop 58PCCDI, 19 mai 2020. On-line.	Prezentare orala

		Leonat, T. Savopol, M.G. Moisescu, L.C. Miclea		
24	Scurtă introducere asupra stadiului de dezvoltare a proiectului component 3	T. A. Enache	Workshop 58PCCDI, 19 mai 2020. On-line.	Prezentare orala
25	Mecanismul redox al azatioprinei și interacția acesteia cu ADN-ul	M. Bunea, T.A. Enache, M. Enculescu, V.C. Diculescu	Workshop 58PCCDI, 19 mai 2020. On-line.	Prezentare orala
26	Magnetron sputtered bioactive glass implant-type coatings: the road so far and the road ahead	G. E. Stan, A. C. Popa, C. Tanase, H.R. Fernandes, J.M.F. Ferreira	INTERNATIONAL WORKSHOP OF MATERIALS PHYSICS "Materials and structures for bio-applications" Monday, 21st of September	Prezentare orala
27	Newly synthesized micro- and nano- materials for electroanalysis	M. M. Barsan, V.C. Diculescu, I. Enculescu, A. Evanghelidis, E. Matei, M. Enculescu, A. Aldea, R.J. Branco Leote, G.E. Stan, N. Apostol	INTERNATIONAL WORKSHOP OF MATERIALS PHYSICS "Materials and structures for bio-applications" Monday, 21st of September	Prezentare orala
28	Cost efficient oxygen generation through alkaline water electrolysis using Ni on SnO2 mesoporous support- based electrocatalysts	F. Neaţu, Ş. Neaţu, V. C. Diculescu, M. M. Trandafir, N. Petrea, S. Somacescu, F. Krumeich, A. J. Knorpp, J. A. van Bokhoven, M. Florea	44th International Conference and Exposition on Advanced Ceramics and Composites Perioada: 22 ianuarie - 2 februarie 2020 Locație: Daytona, FLORIDA, USA.	Prezentare orală
29	Ternary and quaternary modified silica with transition metal for ethanol transformation	F. Neațu, M. M. Trandafir, Ș. Neațu, M. Florea	44th International Conference and Exposition on Advanced Ceramics and Composites Perioada: 22 ianuarie - 2 februarie 2020 Locație: Daytona, FLORIDA, USA.	Poster
30	La ₂ O ₃ -doped alumina as active catalytic support in CH ₄ combustion	M. M. Trandafir, Ş. Neaţu, F. Neaţu, A. Stănoiu, O. G. Florea, C. E. Simion, C. Cobianu, M. Gheorghe, L. N. Leonat, M. Florea	44th International Conference and Exposition on Advanced Ceramics and Composites Perioada: 22 ianuarie - 2 februarie 2020 Locație: Daytona, FLORIDA, USA.	Prezentare orală

4.2.3. Lucrări publicate în alte publicații relevante:
--

Nr. ctr.	Autori	Titlul comunicării științifice	Revista/Editura-conferința (cod ISSN, ISBN)	Identificator lucrare (vol, pag-pag, an DOI)
1	A.M. Lepadatu, C. Palade, A. Slav, I. Dascalescu, O. Cojocaru, S. Iftimie, V.S. Teodorescu, T. Stoica, M.L. Ciurea	SWIR photoresponse of SiGe/TiO ₂ multilayers with Ge-rich SiGe nanocrystals	978-1-7281-1072-1	Proceedings of IEEE CAS 2020 (International Semiconductor Conference, October 7-9, virtual event), pp. 235-238
2	D. Ursutiu, C. Samoila, P. Kane, M. Ciurea, M. Stremtan, C. Ravariu	"Internet of Things, Infrastructures and Mobile Applications. IMCL 2019. Advances in Intelligent Systems and Computing"	978-3-030-49931-0	Proceedings of the 13th IMCL Conference, vol. 1192, Eds. M.E. Auer, T. Tsiatsos, p. 995-1001

Nr.	Autori	Titlul	Revista/Editura-conferința	Identificator	Obsevații
ctr.		carții/Capitolui	(coa 155N, 15BN)	lucrare	(daca este
				(voi, pag-pag, an	cazul)
1	D Dating C	Control of the	ISDN 078 2 020 22202 7	Con 11 in contro	
1	P. Badica, G.	Control of the	ISBN 978-3-030-23303-7	Cap 11, in cartea	
	Aldica, M.	Critical Current		Superconductivity	
	Burdusel, M.	Density Through			
	Grigoroscuta,	Microstructural			
	A. M.	Design by Ho ₂ O ₃			
	Ionescu, V.	and Te co-addition			
	Sandu, S.	into MgB ₂			
	Popa, M.	Processed by Ex			
	Enculescu, I.	Situ Spark Plasma			
	Pasuk, and A.	Sintering			
	Kuncser				
2	L. Miu, I.	Chapter 6	ISBN 978-3-030-23303-7	Superconductivity:	
	Ivan, A. M.	"High		From Materials	
	Ionescu, A.	Vortex activation		Science to Practical	
	Crișan, D.	energies in the AC		Applications	
	Miu, T.	magnetic response		Chapter 6	
	Petrisor, P.	of superconductors			
	Mele	close to the DC			
		irreversibility line"			
3	R. Dragomir	Fenomene de	978-606-94603-2-0	Editura Horia	
		transport si		Hulubei	
		dinamica de			
		excitoni in doturi			
		cuantice active			
		optic			
4	M. L. Ciurea,	Electrical	978-3-319-04508-5	Handbook of Porous	

	A. M. Lepadatu	Characterization Techniques for Porous Silicon		Silicon, pp.655
5	A. Bârsan, V. Kuncser	Zr-based Heusler Compounds for Biomedical Spintronic Applications	DOI: 10.5772/intechopen.93372	Carte: Magnetic materials
6	C. Bartha, C. Secu, M. Secu	Cap16. "Multifunctional magnetic, optical and electrical nanomaterials processed by sol- gel method"	ISBN: 9780128180198	Volumul "Sol-Gel Derived Optical and Photonic Materials", Editori: Rui Almeida, Alessandro Martucci, Luis Santos, Rocío Estefanía, Rojas Hernández, Woodhead Publishing (December 2020)

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

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

Tip documet	Nr. total	Publicat în:
Hotărâre de Guvern	-	
Lege	-	
Ordin ministru	-	
Decizie președinte	-	
Standard	_	
Altele (se vor preciza)	-	

<u>b) au contribuit la promovarea științei și tehnologiei</u> - evenimente de mediatizare a științei și tehnologiei:

Tip eveniment	Nr. aparitii	Nume eveniment:
web-site	multe	www.infim.ro
Emisiuni TV	-	-
Emisiuni radio	-	-
Presă scrisă/electronică	4	Market Watch
Cărți	-	-
Reviste	4	Market Watch
Bloguri	3	Contributors.ro
Altele (se vor preciza)	4	Scoala Altfel Noaptea Cercetatorilor

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

Тір	Anul 2020
Tehnologii	2

Procedee	7
Produse informatice	2
Rețete	2
Formule	2
Metode	-
Altele asemenea (se vor specifica)	-

Din care:

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

<u>Cereri de brevete depuse</u>

Nr.	Titular (Nume și prenume)	Titlu brevet
Crt.		
1	Poloșan S.P., Păcală O.	A00010/14.01.2020 (A00342/06.06.2019 redepus)
		Metoda de tratare a suprafețelor în fascicul de electroni de joasă
		energie
2	Bădică P., Gâlcă A.C., Grigoroșcuță M.A.,	A00105/26.02.2020
	Burdușel M., Aldica G.V., Socol G., Mihailescu A., Lorinczi A.	Material optic, sensibil la gazul NO_2 la temperaturi joase
3	Kuncser A.C., Radu C., Stănoiu A., Simion C.E.	A00226/28.04.2020
		Procedeu de determinare a suprafetei specifice prin prelucrare
		automată a tomogramelor de electroni
4	Iuga A.R., Lazăr M., Iacob N.	A00240/05.05.2020
		(A000737/13.11.2019 redepus - titlu vechi - Cuplaj magneto-
		mecanic cuadrupolar)
		Mecanism magneto-mecanic ortogonal cu cuplaj magnetic axial
5	Baibarac M., Serbschi C.	A00307/02.06.2020
		Dispozitiv electronic pentru calibrare automată a senzorilor
		electrochimici de acid folic, pentru mărirea duratei de utilizare a
		acestora
6	Baibarac M., Serbschi C.	A00308/02.06.2020
		Celulă de măsurare pentru senzori electrochimici de acid folic
7	Cotîrlan S.C.	A00386/06.07.2020
		Superlentilă cu metasuprafață controlată electric pentru
		modificarea continuă a direcției sau focalizării fasciculului optic
		refractat
8	Preda N.R., Costaș L.A., Beregoi M., Enculescu	A00391/08.07.2020
	I.M.	Procedeu de funcționalizare a unor membrane naturale extrase
		din coji de ou cu materiale anorganice nanostructurate prin
		pulverizare catodică în RF
9	Predoi D., Iconaru S.L., Predoi G., Raita Ș.M.,	A00447/27.07.2020
	Cîmpeanu C.L., Badea M.L., Petcu E., Mustatea	Fertilizarea plantelor de grâu folosind soluția stabilă de
	Р.	nanoparticule de oxid de fier
10	Baibarac M., Serbschi C.	A00553/02.09.2020
		Rejecție erori măsurare pentru senzori electrochimici de acid
		folic bazați pe compozite de tip polipirol și nanotuburi de carbon
11	Costaș L.A., Preda N.R., Florica C.F., Zgură	A00627/07.10.2020
	I.I., Enculescu M.M., Enculescu I.M.	Procedeu de obținere a unor matrici de nanofire de tip miez-
		coajă pe bază de oxid de cupru și dioxid de titan
12	Buruiană A.T., Sava F., Matei E., Zgură I.,	A00631/12.10.2020
	Burdușel M., Mihai C., Velea A.	Suprafețe acoperite cu nanoparticule metalice cu proprietăți
		hidrofobe și metodă simplă și curată pentru obținerea acestora

13	Beșleagă Stan C., Stancu V., Pintilie L.	A00632/12.10.2020
		Foto-tranzistor în strat subțire, pe bază de perovskiți halogenați
		fără plumb, având diodă ionică în rol de poartă și metodă de
		obținere
14	Stan G., Popa A.C., Beșleagă Stan C.	A00633/12.10.2020
		Procedeu de realizare a unui implant endoosos cu activitate
		antimicrobiană extinsă, condiționată ca intensitate și durată prin
		grosimea stratului bioresorbabil de acoperire din sticlă fosfatică
		cosubstituită
15	Stavarache I., Ciurea L.M.	A00668/26.10.2020
		Fotodetector de bandă largă pe bază de nanoparticule de
		germaniu inglobate în nitrură de siliciu
16	Udrescu A., Dăescu M., Baibarac M.	A00691/02.11.2020
		Proces pentru obținerea compozitelor bazate pe oxid de fier și
		nanotuburi de carbon cu doi pereți
17	Ţolea F., Palade P., Popescu V.B., Kuncser	A000734/16.11.2020
	A.C., Sofronie M.	Material magnetic pe bază de benzi metalice solidificate
		ultrarapid din topitură pe tambur rotitor ce conține cobalt,
		zirconiu, crom, carbon, molibden, bor și procedeu de obținere a
		lui
18	Dinescu M., Udrescu A., Baibarac M., Fejer S.	A00735/16.11.2020
		Procedeu chimic de asamblare a senzorilor bazați pe oxid de
		grafenă funcționalizați cu poli(5-amino-1-naftol) pentru detecția
		receptorului factorului de creștere epidermal
19	Enache T.A., Costaș L.A., Botta O.D., Matei E.,	A00755/19.11.2020
	Diculescu V.C.	Metodă de fabricare a unei platforme analitică duale pentru
		detecție electrochimică și colorimetrică
20	Petre R., Epure G., Petrea N., Ginghina R.,	A00783/25.11.2020
	Neațu F., Florea M., Neațu Ș.	Pachete balistice pentru echipamente de protecție rezistente la
		stres dinamic

Brevete acordate

Nr. Crt.	Titular (Nume și prenume)	Titlu brevet	Nr. Brevet
1	Preda N.R., Florica C.F., Enculescu	Procedeu de obținere prin	Hotărârea Nr. 3/2 din 30.01.2020
	M.M., Zgură I.I., Socol M.,	depunere chimica a unor	
	Evanghelidis A.I., Costas L.A., Oancea	filme nanostructurate tip	
	M., Busuioc C., Matei E., Enculescu	rețele formate din structuri	
	I.M.	monodisperse de oxid de	
		zinc	
2	Stan G., Popa A.C.	Procedeu de realizare a unui	Hotărârea Nr. 4/26 din 30.01.2020
		implant cu acoperire din	
		sticla bioactivă, pentru	
		restaurații dentare	
3	Ghiță R., Logofătu C., Negrilă C.C.,	Procedeu de pasivarea a	Hotărârea Nr. 3/33 din 30.03.2020
	Frumosu F., Predoi D.	suprafeței de n-GaSb (100)	
4	Secu M., Gâlcă A.C., Poloșan S.P.,	Dispozitiv pentru detectarea	Hotărârea nr. 6/3 din 29.05.2020
	Gavrilă A., Cioca M., Dobrescu G.,	însemnelor de securizare	U 2019 00026
	Ighigeanu A.M.	documente tip "Up-	
		conversion"	
5	Galatanu A., Cioca M., Galatanu M.,	Matriță cu geometrie	Hotărârea nr. 4/12 din 29.05.2020
	Popescu B., Enculescu M.	tronconică pentru controlul	U 2019 00038
		precis al temperaturii în	
		cadrul sudării prin difuzie	
		termică sau brazarii	
		materialelor dedicate	

		aplicațiilor în condiții	
		extreme	
6	Galatanu A., Cioca M., Ighigeanu A.	Matriță segmentată pentru	Hotărârea nr. 4/33 din 29.05.2020
	M., Ruiu G.D.	sinterizarea de pulberi	U 2019 00039
		nanometrice în piese	
		complexe cu formă finală	
7	Florica C.F., Preda N.R., Enculescu	Procedeu de obținere a unor	Hotărârea nr. 4/140 din 30.06.2020
	M.M., Evanghelidis A.I., Costaș L.A.,	structuri micronice de oxid	
	Oancea M., Busuioc C., Matei E.,	de zinc prin depunere	
	Enculescu I.M.	autocatalitică pe arii	
		predefinite	
8	Cotîrlan-Simionuc C., Manea Ștefan A.,	Structura de superlentilă	Hotărârea nr. 44/113 din 30.09.2020
	Logofătu C.	electrooptică pentru	
		imagistica cu rezoluție sub	
		limita de difractie	

4.4. Structura de personal:

Personal CD (Nr.)	Anul
	2020
Total personal	310
Total personal CD	233
Total personal cu studii superioare	214
Total personal cu doctorat	150
Total personal doctoranzi	28

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

Nr.	Nume și prenume	Grad	Funcția	Echivalent normă întreagă 2020	Anul angajării	Nr. Ore/2019 (1736)
1	ABRAMIUC(STOFLEA) LAURA	CS		0.42	2012	792
2	ALDEA ANCA	ACS		0,79	2017	1486
3	ALEXANDRU DINU ANDREI	ACS		0.26	2019	492
4	AMARANDE LUMINITA	CS III		0.88	1986	1765
5	APOSTOL NICOLETA	CS II		0.57	2006	1074
6	BADICA PETRE	CS I		0.34	1996	647
7	BAIBARAC MIHAELA	CS I	Sef lab.	0.38	1995	725
8	BANCIU GABRIEL MARIAN	CS I		0.93	1989	1867
9	BARSAN ANCUTA	CSIII		0.92	2005	1735
10	BARTHA (VALSANGIACOM) MARIA CRISTINA	CS		0.73	2002	1382
11	BARZA ALEXANDRU MARIUS	ACS		0.3	2018	560
12	BESLEAGA CRISTINA	CSIII		0,47	2012	950
13	BEREGOI MIHAELA	CS		0.78	2013	1562

14	BOCIRNEA AMELIA ELENA	ACS	0.36	2013	674
15	BONI(IBANESCU) ANDRA GEORGIANA	CSIII	0.47	2010	950
16	BORCAN ELENA LARISA	ACS	0.3	2018	560
17	BORCA BOGDANA-LENUTA	CSIII	0.33	2015	628
18	BOTEA MIHAELA	CS	0.82	2012	1649
19	BOTTA OANA-DACIANA	ACS	0.35	2019	699
20	BREAZU CARMEN STELIANA	CS	0,26	2012	484
21	BUCUR CRISTINA IOANA	CS	0.57	2006	1079
22	BULAT STEFAN	IDT.	0.56	2014	1053
23	BUNEA MIHAELA CRISTINA	ACS	0.19	2018	379
24	BURDUSEL MIHAIL	CSIII	0.49	2011	925
25	BURLANESCU TEODORA	ACS	0.05	2020	85
26	BURUIANA ANGEL	ACS	0.12	2019	221
27	CERCEL RADU	ACS	0.23	2018	435
28	CERNEA MARIN	CS I	0,91	2000	1720
29	CHIOIBASU MARIAN	TEHN.I	0.55	2007	1040
30	CHIRILA FLORENTINA CRISTINA	CSIII	0.19	2008	388
31	CHIRICA MARIA-IULIANA	ACS	0.25	2018	507
32	CIOANGHER MARIUS CRISTIAN	CS	0.92	2001	1844
33	CIOBOTARU CONSTANTIN	CS	0,99	2012	1876
34	CIOBOTARU IULIA CORINA	CS	0.79	2010	1491
35	CIOBANU STELUTA	CSIII	0,71	2013	1433
36	CIOCA EUGEN MIHAIL	IDT	0.44	2011	879
37	COJOCARU OVIDIU	ACS	0.07	2018	138
38	COMANESCU CEZAR CATALIN	CSIII	0,88	2011	1654
39	COSTAS ANDREEA	CS	0.97	2012	1827
40	COSTESCU MARIA RUXANDRA	CS III	0,67	2010	1264
41	COTARLAN SIMIONUC COSTEL	CSIII	0,79	2005	1487
42	CRISAN ALINA	CS II	0,58	2003	1103
43	CRISAN IOAN ADRIAN	CS I	0.07	1987	124
44	CRISAN DANIEL	CS	0.12	2018	250
45	CRISAN OVIDIU	CS I	0.36	1993	685
46	CRISTEA MIRELA	ACS	0.23	2018	442
47	CULEA NICOLAE LIVIU	TEHN	0.59	2011	1121
48	DAESCU MONICA ALEXANDRA	ACS	0,32	2013	598
49	DICULESCU VICTOR	CSI	0.78	2016	1476
50	DINU ION VIOREL	CS III	 0,80	2001	1502
51	DOBRE DUMITRU MARIAN	TEHN	 0.53	2010	1004
52	DOBRESCU GABRIEL	IDT3	0.55	2014	1033
53	DRAGOMIR RADU	ACS	0,85	2012	1596
54	DRAGU ANDREEA	ACS	0.07	2020	136

55	ENCULESCU MARIA MONICA	CS I		0.99	1996	1877
56	EVANGHELIDIS ALEXANDRU	CSIII		0,78	2012	1573
57	FILIP LUCIAN DRAGOS	CS II		0,61	2010	1216
58	FLOREA IOANA	TEHNII		0.52	1986	979
59	FLOREA OVIDIU GABRIEL	ING		0.99	2014	1867
60	FLORESCU VIORICA	TEHN. II		1	1983	1888
61	FRUMOSU (UNGUREANU) FLORICA	Expert achizitii		0.82	2004	1543
62	FLOREA MIHAELA	CS I		0,61	2017	1219
63	GALATANU ANDREI	CS I		0.2	1994	381
64	GALATANU MAGDALENA	CS		0.64	2008	1201
65	GALCA CATALIN AURELIAN	CS I		0.5	2006	936
66	GANEA CONSTANTIN PAUL	CSIII		0,71	2007	1340
67	GASPAR DALMA	TEHN. II		0,99	1990	1865
68	GEAMBASU CEZAR DRAGOS	TEHN I		0,93	2010	1764
69	GHEGOIU LILIANA	ACS		0.04	2019	73
70	GHICA CORNELIU	CS I	Sef lab.	0.7	1994	1322
71	GHICA DANIELA	CS II		0.92	1998	1746
72	GHITA IRINA SORINA	ACS		0.86	2008	1725
73	GRECULEASA(SANDU)SIMONA GABRIELA	CSIII		0,76	2010	1426
74	GRIGOROSCUT MIHAI ALEXANDRU	ACS		0.91	2015	1712
75	HOGAS CRISTINEL	ING		0.54	2019	1024
76	HOLDEAN GILDA	TEHN. II		0.89	1988	1674
77	HRISTEA IOANA ADELA	ACS		0.2	2018	377
78	HUSANU MARIUS ADRIAN	CS II		0.62	2006	1172
79	IANCU ALEXANDRU CRISTI	ACS		0.92	2018	1728
80	ICONARU SIMONA LILIANA	CS III		0,67	2010	1345
81	IGHICEANU ADELINA	IDT3		0.42	2018	792
82	ILAS MONICA	ACS		019	2018	352
83	ION ANTON	TEHN. I		0.99	1983	1872
84	IUGA ALIN	CS III		0.44	1987	830
85	IVAN ALEX ROBERT	ACS		0.03	2020	48
86	IVAN ION	CS		0.39	2006	735
87	ISTRATE MARIAN	ACS		0,55	2016	1047
88	IACOBAN ALEXANDRA	ACS		0.04	2012	79
89	IACOB NICUSOR	CSIII		0.89	2017	1673
90	IGNAT –BARSAN MADALINA	CSII		0.17	2017	335
91	IOSIF MARIAN	ING		0.59	1984	1108
92	JOITA ALEXANDRA CAMELIA	ACS		0.77	2012	1446
93	KUNCSER ANDREI	CSIII		0.74	2012	1398
94	KUNCSER VICTOR	CS I	Sef lab.	0.23	1990	427

95	LAZANU SORINA	CS I		0.51	1984	964
96	LAZAR MARIN	SUBING.		0.6	3019	1201
97	LECA AUREL	IDT 3		0.78	2011	1471
98	LEONAT LUCIA	CSII		0,86	2016	1721
99	LEPADATU ANA MARIA	CS III		0, 1	2006	182
100	LOCOVEI CLAUDIU	ACS		0.28	2018	534
101	LOGOFATU CONSTANTIN	CS III		0,72	1993	1365
102	LORINCZI ADAM	CS II		0,76	1995	1437
103	LUNGU GEORGE ADRIAN	CSIII		0.72	2002	1354
104	LUTEA ION	TEHN. I		0.52	1985	975
105	MARALOIU VALENTIN ADRIAN	ING.		0.85	2004	1596
106	MATEI ELENA	CSI		0.88	2006	1667
107	MERCIONIU IONEL	ACS		0.61	2004	1149
108	MICLEA CORNELIU FLORIN	CS I		0,97	1997	1823
109	MIHAI MIHAI	ING		0.78	2015	1474
110	MIHALCEA CATALINA	ACS		0.14	2018	270
111	MIHALCEA GHEORGHE	TEHN		0.2	2009	378
112	MIHALACHE VALENTINA	CS III		0.98	2000	1842
113	MIHOCI MIHAI-IULIAN	TEHN		0.32	2016	612
114	MIREA(COMAN) ANCA	ACS		0.17	2018	334
115	MOLDOVEANU VALERIU	CS I	Sef lab.	1	1990	1888
116	NEATU STEFAN	CSII		0,21	2014	388
117	NEATU FLORENTINA	CSII		0,28	2017	531
110				0.65	2002	1220
118	NEDELCU LIVIU	CS II		0,05	2002	
118 119	NEGREA RALUCA FLORENTINA	CSIII		0.18	2002	339
118 119 120	NEGREA RALUCA FLORENTINA NEGRILA CONSTANTIN CATALIN	CSIII CSIII CS III		0.18	2002	339 1428
118 119 120 121	NEGREA RALUCA FLORENTINA NEGRILA CONSTANTIN CATALIN NICOLAEV ADELA	CSIII CSIII CSIII CSIII		0,00 0.18 0,76 0.24	2002 2001 2018	339 1428 460
118 119 120 121 122	NEGREA RALUCA FLORENTINA NEGRILA CONSTANTIN CATALIN NICOLAEV ADELA NILA ANDREEA ALEXANDRA	CSIII CSIII CSIII CSIII ACS		0,00 0.18 0,76 0.24 0,35	2002 2001 2018 2013	339 1428 460 656
118 119 120 121 122 123	NEGREA RALUCA FLORENTINA NEGRILA CONSTANTIN CATALIN NICOLAEV ADELA NILA ANDREEA ALEXANDRA NITA MARIAN	CSIII CSIII CSIII CSIII ACS CSIII		0,00 0.18 0,76 0.24 0,35 0,93	2002 2001 2018 2013 1995	339 1428 460 656 1764
118 119 120 121 122 123 124	NEGREA RALUCA FLORENTINA NEGRILA CONSTANTIN CATALIN NICOLAEV ADELA NILA ANDREEA ALEXANDRA NITA MARIAN NITESCU ANDREI	CSIII CSIII CSIII CSIII ACS CSIII ACS		0,05 0.18 0,76 0.24 0,35 0,93 0.05	2002 2001 2018 2013 1995 2020	339 1428 460 656 1764 99
118 119 120 121 122 123 124 125	NEGREA RALUCA FLORENTINA NEGRILA CONSTANTIN CATALIN NICOLAEV ADELA NILA ANDREEA ALEXANDRA NITA MARIAN NITESCU ANDREI NITU VICTOR	CSIII CSIII CSIII CSIII ACS CSIII ACS TEHN		0,00 0.18 0,76 0.24 0,35 0,93 0.05 0.59	2002 2001 2018 2013 1995 2020 1986	339 1428 460 656 1764 99 1110
118 119 120 121 122 123 124 125 126	NEGREA RALUCA FLORENTINA NEGRILA CONSTANTIN CATALIN NICOLAEV ADELA NILA ANDREEA ALEXANDRA NITA MARIAN NITESCU ANDREI NITU VICTOR OSTAHIE BOGDAN	CSIII CSIII CSIII CSIII ACS CSIII ACS TEHN ACS		0,05 0.18 0,76 0.24 0,35 0,93 0.05 0.59 0.57	2002 2001 2018 2013 1995 2020 1986 2010	339 1428 460 656 1764 99 1110 1073
118 119 120 121 122 123 124 125 126 127	NEGREA RALUCA FLORENTINA NEGRILA CONSTANTIN CATALIN NICOLAEV ADELA NILA ANDREEA ALEXANDRA NITA MARIAN NITESCU ANDREI NITU VICTOR OSTAHIE BOGDAN ONEA MELANIA	CSIII CSIII CSIII CSIII ACS CSIII ACS TEHN ACS ACS		0,05 0.18 0,76 0.24 0,35 0,93 0.05 0.59 0.57 0.58	2002 2001 2018 2013 1995 2020 1986 2010 2016	339 1428 460 656 1764 99 1110 1073 1168
118 119 120 121 122 123 124 125 126 127 128	NEGREA RALUCA FLORENTINA NEGRILA CONSTANTIN CATALIN NICOLAEV ADELA NILA ANDREEA ALEXANDRA NITA MARIAN NITESCU ANDREI NITU VICTOR OSTAHIE BOGDAN ONEA MELANIA PALADE CATALIN	CSIII CSIII CSIII CSIII ACS CSIII ACS TEHN ACS ACS ACS		0,05 0.18 0,76 0.24 0,35 0,93 0.05 0.59 0.57 0.58 0.17	2002 2001 2018 2013 1995 2020 1986 2010 2016 2010	339 1428 460 656 1764 99 1110 1073 1168 321
118 119 120 121 122 123 124 125 126 127 128 129	NEDELCU LIVIU NEGREA RALUCA FLORENTINA NEGRILA CONSTANTIN CATALIN NICOLAEV ADELA NILA ANDREEA ALEXANDRA NITA MARIAN NITESCU ANDREI NITU VICTOR OSTAHIE BOGDAN ONEA MELANIA PALADE CATALIN PALADE PETRU	CSIII CSIII CSIII CSIII ACS CSIII ACS TEHN ACS ACS ACS CSII		0,00 0.18 0,76 0.24 0,35 0,93 0.05 0.59 0.57 0.58 0.17 0.53	2002 2001 2018 2013 1995 2020 1986 2010 2016 2010 1995	339 1428 460 656 1764 99 1110 1073 1168 321 1003
118 119 120 121 122 123 124 125 126 127 128 129 130	NEGREA RALUCA FLORENTINA NEGRILA CONSTANTIN CATALIN NICOLAEV ADELA NILA ANDREEA ALEXANDRA NITA MARIAN NITESCU ANDREI NITU VICTOR OSTAHIE BOGDAN ONEA MELANIA PALADE CATALIN PALADE PETRU PASUK IULIANA	CS II CS III CS III CS III ACS CS III ACS TEHN ACS ACS ACS CS II CS III		0,00 0,18 0,76 0,24 0,35 0,93 0.05 0.59 0.57 0.58 0.17 0.53 0,46	2002 2001 2018 2013 1995 2020 1986 2010 2016 2010 1995 2006	339 1428 460 656 1764 99 1110 1073 1168 321 1003 931
118 119 120 121 122 123 124 125 126 127 128 129 130	NEDELCU LIVIU NEGREA RALUCA FLORENTINA NEGRILA CONSTANTIN CATALIN NICOLAEV ADELA NILA ANDREEA ALEXANDRA NITA MARIAN NITESCU ANDREI NITU VICTOR OSTAHIE BOGDAN ONEA MELANIA PALADE CATALIN PALADE PETRU PASUK IULIANA PATRU ROXANA	CS II CS III CS III CS III ACS CS III ACS TEHN ACS ACS ACS CS II CS III CS III		0,00 0.18 0,76 0.24 0,35 0,93 0.05 0.59 0.57 0.58 0.17 0.53 0,46 0.5	2002 2001 2018 2013 1995 2020 1986 2010 2016 2010 1995 2006 2018	339 1428 460 656 1764 99 1110 1073 1168 321 1003 931 1000
118 119 120 121 122 123 124 125 126 127 128 129 130 131	NEDELCULIVIUNEGREA RALUCA FLORENTINANEGRILA CONSTANTIN CATALINNICOLAEV ADELANILOLAEV ADELANILA ANDREEA ALEXANDRANITA MARIANNITESCU ANDREINITU VICTOROSTAHIE BOGDANONEA MELANIAPALADE CATALINPALADE PETRUPASUK IULIANAPATRU ROXANAPENA ADRIAN	CS II CS III CS III CS III ACS CS III ACS CS III ACS ACS ACS CS III CS III CS III CS ACS		0,00 0,18 0,76 0,24 0,35 0,93 0.05 0.59 0.57 0.58 0.17 0.53 0,46 0.5 0.24	2002 2001 2018 2013 1995 2020 1986 2010 2016 2010 1995 2006 2018 2018	339 1428 460 656 1764 99 1110 1073 1168 321 1003 931 1000 460
118 119 120 121 122 123 124 125 126 127 128 129 130 131 132	NEDELCU LIVIUNEGREA RALUCA FLORENTINANEGRILA CONSTANTIN CATALINNICOLAEV ADELANILOLAEV ADELANILA ANDREEA ALEXANDRANITA MARIANNITESCU ANDREINITU VICTOROSTAHIE BOGDANONEA MELANIAPALADE CATALINPALADE PETRUPASUK IULIANAPATRU ROXANAPETRE GABRIELA	CS IICS IIICS IIICS IIIACSCS IIIACSTEHNACSACSCS IICS IICS IIICS IIICS ACSACSACS		0,00 0.18 0,76 0.24 0,35 0,93 0.05 0.59 0.57 0.58 0.17 0.53 0,46 0.5 0.24	2002 2001 2018 2013 1995 2020 1986 2010 2016 2010 1995 2006 2018 2018 2018	339 1428 460 656 1764 99 1110 1073 1168 321 1003 931 1000 460 425

135	PINTILIE IOANA	CS I	0,29	1985	590
136	PINTILIE LUCIAN	CSI	0.05	1987	98
137	POLOSAN SILVIU	CS I	0,43	1993	866
138	POPESCU ADRIAN TEODOR	TEHN II	0.94	1989	1774
139	POPESCU BOGDAN	CS	0,86	2002	1623
140	POPESCU TRAIAN	CSIII	0,83	2009	1575
141	PREDA NICOLETA ROXANA	CS I	0.80	2000	1453
142	PREDOI DANIELA	CS I	0,75	1994	1510
143	RADU ANDREEA	ACS	0.26	2018	482
144	RADU DANA	ACS	0.5	2018	946
145	RADU ROXANA	ACS	1	2008	1888
146	RADU CRISTIAN	ACS	0.60	2016	1138
147	RADULESCU ANDREEA	ACS	0.06	2019	127
148	RADULESCU CATALIN	TEHN. I	0.99	2006	1858
149	RADULESCU MARIA	TEHN. II	0.95	1981	1787
150	RASOGA OANA	CS III	0,27	2006	512
151	ROSTAS ARPAD MIHAI	CSIII	0.07	2018	129
152	RUIU GEORGE	TEHN	0.47	2006	879
153	RUSU DORIN	ACS	0.05	2015	107
154	SAVA FLORINEL	CSII	0,60	1994	1134
155	SCHINTEIE GABRIEL	CSII	0.67	2001	1269
156	SECU CORINA	CS III	0.88	1996	1670
157	SECU MIHAI	CS I	0,70	1992	1321
158	SERBAN ARIANA	ACS	0.08	2019	156
159	SERGENTU ANY CRISTINA	ACS	0.11	2020	208
160	SIMA MARIAN	CS II	0.87	1983	1635
161	SIMANDAN IOSIF DANIEL	CS	0.44	2009	838
162	SIMION CRISTIAN	CSIII	0.78	2005	1482
163	SIMION DAN CONSTANTIN	ACS	0.16	2019	321
164	SLAV ADRIAN	CSIII	0,13	2002	252
165	SMARANDA ION	CS	0,34	2009	642
166	SOARE PETRE	TEHN	0.74	2014	1406
167	SOCOL MARCELA	CS II	0.62	2001	1177
168	STAN ELENA	TEHN II	0,67	1980	1256
169	SOFRONIE MIHAELA	CSIII	0.9	2000	1705
170	STAN GEORGE	CS II	0,55	2005	1096
171	STANCIU ANDA ELENA	ACS	0.61	2014	1146
172	STANCIU STEFAN	ACS	0.85	2016	1603
173	STANCU MARIA	ING	0.75	2017	1407
174	STANCU VIORICA	CS III	0,57	2001	1139

175	STANCULESCU ANCA IOANA	CS I	0.6	2001	1125
176	STANOIU (TOMESCU) ADELINA	CS II	0.82	1983	1546
177	STAVARACHE IONEL	CS II	0.17	2003	316
178	STEFAN MARIANA	CS II	1	1991	1888
179	STOICU ALEXANDRU	TEHN. I	0.6	2011	1124
180	STINGESCU MARIA_LUIZA	ACS	0.23	2018	441
181	STOICU CORNELIA	TEHN. II	0,72	1981	1360
182	STROE(SCOCIOREANU)MALVINA SIMONA	CS	0.34	2008	642
183	STOICA SABIN	CSI	1	2016	1888
184	TACHE CRISTIAN	ING.	0.19	2011	350
185	TANCU ELENA	TEHN.I	0.44	2006	798
186	TEODORESCU CRISTIAN-MIHAIL	CS I	0.44	1990	840
187	TITE MARTIAL TEDDY	CSII	0.28	2018	554
188	TOLEA FELICIA	CSIII	0.4	2001	750
189	TOLEA MUGUREL	CS II	0.77	2001	1460
190	TOMA VASILICA	SUBING.	0.94	1986	1778
191	TOMULESCU ANDREI	ACS	0.28	2013	565
192	TONCIU IOANA	TEHN	0.51	1980	956
193	TRANDAFIR MIHAELA MIRELA	CSIII	0.09	2018	176
194	TRUPINA LUCIAN	CS III	0.98	1996	1841
195	UDRESCU (MATEA)ADELINA	ACS	0.33	2012	619
196	TUDOR EUGEN PETRU	TEHN	0,49	2012	927
197	VELEA ALIN	CSII	0,51	2007	959
198	VLAICU AUREL MIHAI	CS III	0.62	1992	1169
199	VLAICU IOANA DORINA	ACS	0,83	2011	1573
200	ZGURA IRINA IONELA	CS II	0.22	2001	414

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

4.5. Infrastructuri de cercetare rezultate din derularea programului-nucleu. Obiecte fizice și produse realizate în cadrul derulării programului; colecții și baze de date conținând înregistrări analogice sau digitale, izvoare istorice, eșantioane, specimene, fotografii, observații, roci, fosile și altele asemenea, împreună cu informațiile necesare arhivării, regăsirii și precizării contextului în care au fost obținute:
Nr.	Nume infrastructură / obiect / bază de date	Data achiziției	Valoarea achiziției (lei)	Sursa finanțării	Valoarea finanțării infrastructurii din bugetul Progr. Nucleu	Nr. Ore-om de utilizare a infrastructurii pentru Programul- nucleu
1	Potentiostat / Galvanostat tip autolab PGSTAT204	10.11.2029	71,000.01	Nucleu	71,000.01	1000
2	Centrifuga pentru filme subtiri Ossila	23.10.2020	12,511.45	Nucleu + PCCF 16	10,392.45	1200
3	Mixer paste ceramice	05.11.2020	48,541.33	Nucleu	48,541.33	1600
4	Server HP ProLiant DL560 Gent10	28.10.2020	69,602.15	Nucleu	69,602.15	1600
5	Lap-top MacBook Air 13" Retina	04.12.2020	3,328.06	Nucleu	3,328.06	1600
6	Xerox multifunctional	27.10.2020	13,271.62	Nucleu	13,271.62	1600
7	NotebooK HP	27.10.2020	7,350.00	Nucleu	7,350.00	1600
8	Evoline 19 rack	23.11.2020	20,469.23	Nucleu	20,469.23	1600
9	Lap-top DELL precision 5550 (2 buc)	23.10.2020	26,656.00	Nucleu	26,656.00	1500
10	Licenta Matlab	07.12.2020	12,376.15	Nucleu	12,376.15	1200

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

	Nr.	Тір
Proiecte internaționale	7	ERC-H2020; M-ERA- NET
Proiecte naționale	44	PCE, ELI-NP, Solutii

6. Rezultate transferate în vederea aplicării :

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

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

Nr. ctr./Fact.	Beneficiar	Val. Contract fără TVA	Denumire	Fact. fără TVA
Ctr. 1139/18.07.2014(CW245056/2014)	S.C. Zentiva S.A.		Difractie de raze X(XRD)	

Com.3500010160/06.11.2018		1,788.01	
Com.3500035316/26.11.2019		12,605.04	
F.1/09.01.2020			1,707.99
F.4/17.02.2020			715.41
F.5/19.02.2020			1,111.35
F.10/03.03.2020			968.07
F.13/25.03.2020			726.68
F.14/06.04.2020			724.29
F16/24.04.2020			1,452.42
F17/28.04.2020			96.72
F.20/06.05.2020			724.35
F.23/26.05.2020			725.94
F.24/09.06.2020			725.90
F.29/29.07.2020			725.03
Ctr.1856/1680/26.08.2020	SC Zentiva SA		
F.36/28.08.2020			847.42
F.38/02.09.2020			1,054.97
F.45/06.11.2020			852.16
TOTAL:			13,158.70
Com.1028/09.04.2020	I.C.S.I.	3,000.0	
F.15/13.04.2020			3,000.00
F.30/30.07.2020 POC 58	All Green	14,997.50	14,997.50
Ctr.1421/03.06.2020	Modulator Solution	1,675.00	
F.31/06.08.2020			1,675.00
Ctr.1649/10.07.2020	EOS Electronic Sys	2,000.00	
F.32/10.08.2020			2,000.00
Ctr.4021/01.07.2020	Control data system	4,065.13	
F.33/10.08.2020			4,065.13
Ctr.8077/14.08.2020	Univ. Bucuresti	5,042.02	
F.41/26.10.2020			5,042.02
Ctr.4157/12.10.2020	Control data system	8,192.77	
F.42/30.10.2020			8,192.77
TOTAL:			52,131.12

<u>7. Alte rezultate</u>: (a se specifica, dacă este cazul).

Au fost organizate 2 workshopuri.



5th edition of the International Workshop of Materials Physics

Materials and structures for bio-applications

Magurele, Romania, 21st of September 2020

WORKSHOP

"PROVOCĂRI ACTUALE ȘI SOLUȚII TEHNOLOGICE BAZATE PE NANOMATERIALE ȘI BIOMATERIALE"

19 mai 2020



Institutul Național de Cercetare Dezvoltare pentru Fizica Materialelor

8. <u>Aprecieri asupra derulării programului și propuneri:</u>

Derularea normală a programului Nucleu în anul 2020 a fost perturbată puternic de următorii factori:

- Reducerea arbitrară a fondurilor pentru Programe Nucleu în anul 2020, ceea ce a dus la alocări mai mici față de 2019, și mult mai mici față de sumele care se cuveneau de drept conform legislației în vigoare.

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

- Limitatea arbitrară a regiei pentru Programele Nucleu la 50 %, ceea ce a generat greutăți suplimentare în asigurarea bunei funcționări a infrastructurii de cercetare și în plata personalului administrativ

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

În ciuda acestor impedimente, unele subiective (vezi limitările arbitrare de fonduri și salarii amintite mai sus), altele obiective (pandemia COVID-19), rezultatele Programului Nucleu pentru anul 2020 sunt foarte bune, indicatorii și obiectivele fiind îndepliniți/îndeplinite în proporție de peste 60 %, deși mai sunt încă doi ani de desfășurare.

Merită punctate câteva rezultate deosebite:

- Cercetările și rezultatele obținute în cadrul programului Nucleu au fundamentat două aplicații ERC, una pentru Starting Grant (aplicant Florentina Neațu) și alta pentru Consolidator Grant (aplicant dr. Mihaela Florea). A doua a trecut de prima etapă de evaluare, fiind invitată pentru interviu în octombrie 2020. Chiar dacă propunerea nu va fi finanțată, faptul că s-a ajuns la interviu constituie un rezultat deosebit, având în vedere numărul extrem de redus de aplicații ERC care pleacă din țară, cu instituție gazdă din țară.

- Cercetările și rezultatele preliminare obținute în cadrul programului Nucleu au fundamentat și soluții tehnice pentru problemele ridicate de firme private, acestea fiind valorificate sub forma de contracte subsidiare în cadrul celor două proiecte de tip POC-G în derulare în INCDFM. În momentul de față sunt încheiate 16 contracte subsidiare.

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

Propuneri pentru îmbunătățirea derulării programului Nucleu:

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

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

- Revenirea la o finanțare Nucleu conform legislației în vigoare.

- Eliminarea limitărilor arbitrare la veniturile salariale și la regia Programului Nucleu.

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

DIRECTOR GENERAL, DIRECTOR DE PROGRAM, DIRECTOR ECONOMIC,

Nume și Prenume	Nume și Prenume	Nume și Prenume
Dr. Ionut Enculescu	Dr. Lucian Pintilie	Ec. Gabriela Ivanus

Semnătura

Semnătura

Semnătura