

RAPORT DE ACTIVITATE PE ANUL 2021 AFERENT INSTALAȚIEI/ OBIECTIVULUI DE INTERES NAȚIONAL Rețea Națională de Instalații Complexe de tip XPS/ESCA (poz. 28 din Anexa I a H. G. nr. 786/2014)

1. CARACTERISTICI GENERALE

1.1 SCURT ISTORIC ȘI PREZENTARE GENERALĂ A INSTALAȚIEI/ OBIECTIVULUI DE INTERES NAȚIONAL

Din motive în principal financiare, cercetarea românească s-a manifestat relativ târziu în ceea ce privește știința suprafețelor, deși exista o experiență notabilă datând din anii 1970 în domeniul straturilor subțiri. În condițiile în care o instalație foarte simplă care permite obținerea ultravidului costa cca. 30.000 Euro (fără niciun fel de dispozitiv de preparare sau caracterizare aferent), iar în anii 1990 cercetarea se lupta să supraviețuiască, era clar că nu se putea efectua o asemenea achiziție. Au existat, totuși, încercări notabile de a se construi dispozitive STM cu rezoluție atomică (Universitatea din București, Facultatea de Fizică). În anul 2000, Universitatea Catolică Louvain-la-Neuve a donat INCDFM o instalație ESCA produsă de Vacuum Generators (VG-ESCA Mk II), care a fost declarată Instalație de Interes Național începând cu 2003. Această instalație realiza în special măsurători XPS/ESCA, dar avea și posibilitatea de curățare a probelor prin bombardament ionic și de tratamente termice *in situ*, vidul limită ajungând în domeniul 10^{-7} Pa (10^{-9} mbar).

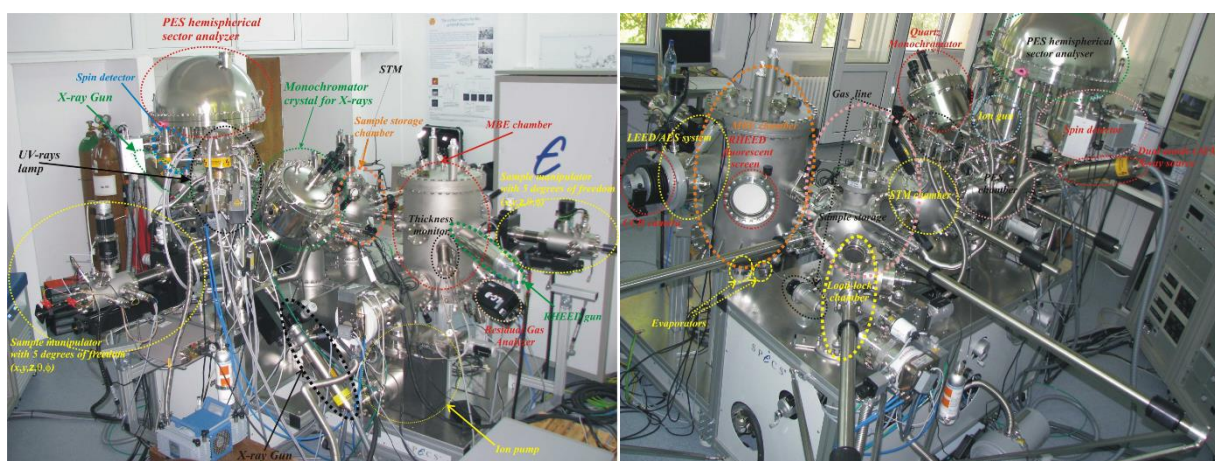


Figura 1. Fotografie și desemnarea principalelor elemente componente ale clusterului de știință suprafețelor, format din instalațiile de epitaxie din fascicul molecular, microscopie de baleiaj cu efect tunel și instalația de spectroscopie de fotoelectroni cu rezoluție unghiulară și de spin. Acest cluster a primit denumirea CoSMoS (Combined Spectroscopy and Microscopy on a Synchrotron) atunci când a fost conectat la linia de fascicul SuperESCA de la facilitatea de radiație de sincrotron Elettra, Trieste. Fabricant: Specs, Berlin, Germania.

Domeniul a explodat și în România începând cu anul 2007, când instalația menționată mai sus a început să fie actualizată printr-un proiect de tip CEEX - Modul 4. Astfel, laboratorul XPS a devenit acreditat RENAR (Certificat de acreditare Nr. LI 724 / 11.11.2008, standard SR EN ISO / CEI 17025:2005). În 2009 a fost pusă în funcțiune o nouă instalație XPS dotată și cu STM („sistem multimetodă”) și a unui cluster XPS - STM - MBE (ultima abreviere semnificând „molecular beam epitaxy”), unde spectroscopia de fotoelectroni este realizată cu rezoluție unghiulară și de spin, cu excitare atât cu raze X cât și UV, iar instalația MBE cuprinde și facilități de caracterizare LEED, RHEED și AES (Figura 1). Prima instalație „multimetodă” a fost și ea suplimentată cu o incintă MBE similară în 2010-2011, rezultând configurația din Figura 2. De asemenea, în 2010 s-a achiziționat în INCDFM și o instalație PEEM care realizează și microscopie de electroni lenți (LEEM). Ambele clusteruri descrise mai sus și instalația LEEM-PEEM au fost integrate pe lângă prima instalație VG-ESCA Mk II în Rețeaua Națională de

Instalații Complexe XPS/ESCA, aprobată la poz. 28 din H.G. nr. 756/2014. De asemenea, în 2015 s-a achiziționat încă o instalație XPS (pe care o vom denumi „Spectromicroscopie cu celulă de reacție”) cu posibilități de spectro-microscopie (analiză XPS pe arii restrânse, mergând până la 2 μm) și posibilitatea de tratament a probelor la presiuni și temperaturi ridicate (4 bar / 1000 $^{\circ}\text{C}$). În momentul de față INCDFM exploatează 5 din cele 14 instalații XPS/ESCA existente în România, trei dintre cele 5 fiind singurele având un grad ridicat de complexitate prin prezența mai multor tehnici asociate și necesare în studiul suprafețelor și interfețelor (MBE, AES, LEED, RHEED, STM, ARUPS, TPD etc.).

Radiația de sincrotron este emisă de particulele relativiste încărcate, accelerate (formula lui Larmor). În fizica particulelor elementare, apare necesar să se înmagazineze aceste particule în „inele de stocare”, înainte de a fi puse în interacțiune. În realitate, datorită pierderii de energie radiativă, inelele de stocare sunt în realitate tot sincrotrone (acceleratoare), deoarece trebuie să conțină dispozitive de accelerare a particulelor încărcate pentru a compensa această pierdere. Așadar, „radiația de sincrotron” era un efect nedorit în fizica energiilor înalte.

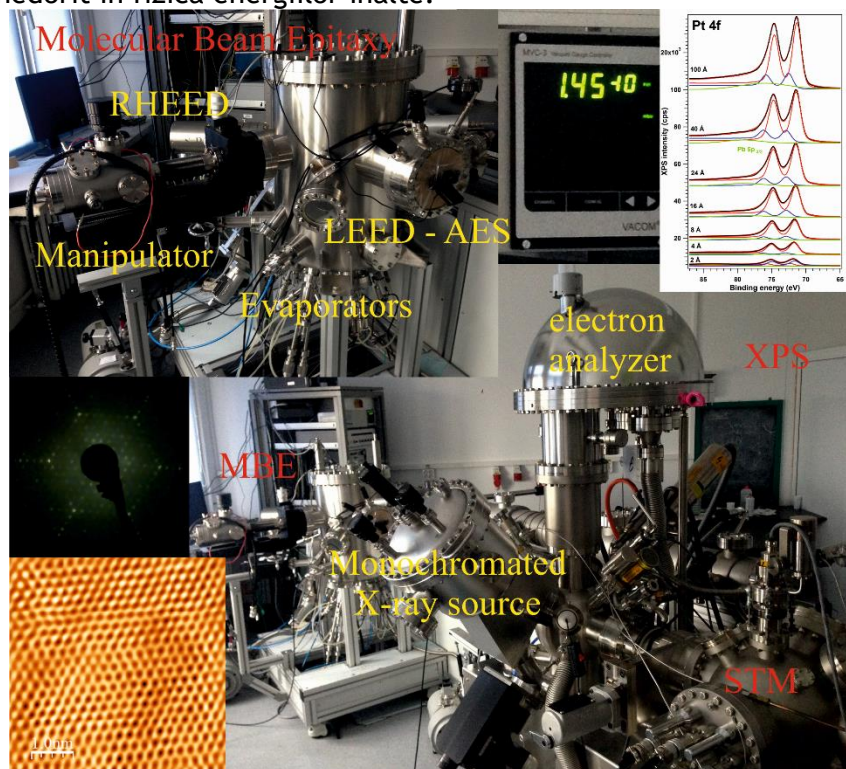


Figura 2. Clusterul de știința suprafețelor și interfețelor („sistemul multimetodă” cuplat cu MBE), localizat în continuare în INCDFM. Cu roșu, principalele componente (XPS, STM, MBE). Cu galben, principalele dispozitive. Alte fotografii din montaj exemplifică presiunea la care se lucrează, calitatea spectrelor XPS, o imagine LEED și o imagine STM. Fabricant: Specs, Berlin, Germania.

Începând cu anii 1960, s-a demonstrat că spectrul radiației de sincrotron este continuu, de la infraroșu până în domeniul radiației X, este concentrat în cea mai mare parte în planul orbitei particulelor încărcate (de acum încolo vom vorbi numai despre electroni și pozitroni, pentru că aceștia emit cu cea mai mare intensitate radiație de sincrotron), este polarizată liniar în acest plan și conține și polarizare circulară dacă ne îndepărtăm de plan etc. Radiația de sincrotron s-a dovedit în scurt timp a fi o sursă ideală pentru investigarea complexă a materiei printr-o multitudine de tehnici: spectroscopii de fotoelectroni, absorbție de raze X în vecinătatea limitei de absorbție (X-ray absorption fine structure XAFS, X-ray absorption near edge structure XANES, extended X-ray absorption fine structure EXAFS), dicroism circular și liniar magnetic în absorbția de raze X (XMCD, XMLD), dicroism magnetic în distribuția unghiulară a fotoelectronilor (LMDAD, CMDAD), difracție și împrăștiere de raze X, efect Mössbauer, spectroscopie Raman și în infraroșu, spectroscopii de ioni în coincidență cu electronii (photoelectron-photoion-photoion coincidence PEPIICO), tehnici de fluorescență (X, UV, Vizibil, IR), tomografie de raze X, metode spectromicroscopice (PEEM, NanoESCA, micro-XAFS) precum și aplicații în domeniul producției de dispozitive micro- și nanoelectronice (litografie folosind raze X).

Într-o primă etapă, cercetările care exploatau radiația de sincrotron au coexistat cu cele din fizica particulelor elementare, pe aceleași instalații. Se extrăgea radiația emisă de electronii / pozitronii care treceau prin magneții care le curbau traiectoriile. Aceasta

reprezintă perioada „sincrotronelor de generația I”. Sincrotronurile de generația I au fost treptat abandonate de comunitatea de fizica particulelor elementare, care se orienta spre instalații capabile să producă energii mai mari; aceste sincrotrone rămăneau în funcțiune, dedicate exploatării radiației de sincrotron. Aceasta s-a întâmplat începând din anii 1960 până la mijlocul anilor 1980. Dată fiind bogăția de rezultate care se puteau obține folosindu-se radiația de sincrotron, au început să fie construite inele de stocare optimizate pentru producerea acestei radiații. Aceste „sincrotrone de generația a II-a” își doreau să concentreze particulele în „pachete” cât mai mici, astfel încât să se scadă dimensiunea sursei de radiație electromagnetică și să asigure un timp de viață cât mai ridicat al particulelor în inel. Concomitent, au început să fie dezvoltate dispozitive de inserție (wigglers sau undulators) care curbează ondulatoriu traiectoria particulelor pe secțiuni altminteri drepte și obțin un flux sporit și direcționat de emisie de radiație electromagnetică, precum și proprietăți de polarizare bine definite, legate de modul cum se ondulează traiectoria. În scurt timp, s-a dovedit că dispozitivele de inserție sunt mult mai performante în producerea radiației de sincrotron decât magnetii de curbură. Sincrotronurile de generația a III-a funcționează în special cu dispozitive de inserție și au dimensiuni ale sursei microscopice, ceea ce le permite obținerea de rezoluții atât spațiale, cât și energetice, foarte ridicate. Acestea s-au dezvoltat începând cu 1992 - 1993 (ESRF Grenoble, Elettra Trieste, Taiwan Light Source și ALS Berkeley fiind primele astfel de instalații). Un sincrotron de generația a III-a are 20-60 de „linii de lumină” (beamlines), pe fiecare existând instalații complexe de caracterizare. Accesul se face, de regulă, pe bază de propuneri de proiecte științifice, evaluate de Comitete specializate, se acordă între 1 și 10 zile de fascicul pentru un proiect și se lucrează 24 de ore din 24, 7 zile din 7. Rata de acceptare a propunerilor este de 10-30 %.

Sincrotronurile de generația a IV-a sunt, în realitate, laseri cu electroni liberi. S-a dovedit că un dispozitiv de inserție de lungime convenabilă poate produce radiație coerentă. Laserii cu electroni liberi au intensități formidabile în domeniile X și UV; din nefericire, puține materiale rezistă la interacțiunea cu aceste fluxuri. Laserii cu electroni liberi au extrem de multe aplicații în materia diluată (gaz sau plasmă), însă pentru fizica materialelor va trebui să ne concentrăm în continuare pe exploatarea sincrotronurilor de generația a III-a.

În momentul de față, în lume există 22 de centre de radiație de sincrotron (am aplicat o limită dimensională privind extensia acestor centre), localizate, în mod evident, în țările cele mai dezvoltate economic: 3 în Statele Unite și în Germania, 2 în Japonia și în Franța, câte unul în Marea Britanie, Italia, Suedia, Spania, Elveția, Taiwan, China, Australia, Brazilia, Rusia, India și Polonia. Așadar, jumătate din aceste centre se află în Europa. De menționat faptul că Polonia, o țară considerabil mai puternică economic decât România, a reușit recent să-și inaugureze un centru la Cracovia, însă dotarea liniilor de fascicul se va produce în anii următori, în timp ce Suedia, considerabil mai bogată, este în momentul de față la a 4-a generație de inele de stocare și a inaugurat simultan în 2016 două astfel de surse (Max IV), cu domenii de energii diferite.

Nu ne putem aștepta ca România să fie capabilă să construiască propria facilitate de radiație de sincrotron în următorii 10 ani. Pare mai rezonabil să adaptăm strategia altor țări din Europa de Est (Cehia și Slovenia), care au semnat acorduri de colaborare cu centrele existente (Elettra Trieste în ambele cazuri, Cehia negociază acum și cu Solaris Cracovia), au finanțat parțial construirea unor linii și și-au localizat instalații pe aceste linii. Pentru România, soluțiile pe termen mediu sunt de a construi o linie la Elettra, unde avem o colaborare (vezi mai jos), sau la sincrotronurile date în funcțiune mai recent, Solaris Cracovia, ALBA Barcelona sau Max IV Lund.

Interesul comunității românești privind experimente folosind radiația de sincrotron a crescut în ultimii ani, atât prin faptul că din ce în ce mai mulți cercetători români colaborează cu echipe care lucrează în mod frecvent la aceste facilități; de asemenea, multe linii de fascicul au ca angajați permanenți cercetători de origine română.

Delocalizarea clusterului CoSMoS la sincrotronul Elettra din Trieste a avut loc între 2013 - 2015 pe linia de fascicul SuperESCA de la Elettra, Trieste, în cadrul unui Proiect de tip „long term proposal” care a avut ca scop studiul interfețelor între grafene și materiale feroelectrice. Instalația a folosit și pentru măsurători dinamice ale materialelor feroelectrice și pentru studii de molecule adsorbite și desorbite pe suprafețe feroelectrice.

În Figura 3 am reprezentat o comparație între spectrele obținute folosindu-se sursa de raze X convențională (Al K α monocromatizat, energie 1486,74 eV) și sursa SuperESCA de la Elettra, Trieste, pe probe absolut similare: straturi subțiri de zirco-titanat de plumb (PZT), de grosime 10 - 100 nm; în realitate, grosimea straturilor nu are nicio importanță pentru XPS, atâta timp cât este cu ordine de mărime mai mare decât parcursul liber mediu al fotoelectronilor datorat ciocnirilor inelastice (cca. 0,5-1 nm). Se observă că statistica spectrelor este similară; totuși, intensitatea obținută la sincrotron este de peste 20 de ori mai mare în condițiile în care rezoluția este mai bună: lărgimea totală a liniilor este de cca. 1,5 eV în laborator și de cca. 1,0 eV la radiația de sincrotron. Achiziția unui spectru a durat cca. 25 minute cu sursa de laborator și sub 1 minut folosindu-se radiația de sincrotron. Rezoluția energetică pe aceste probe este limitată din cauza feroelectricității. În Figura 4 prezentăm spectre obținute la Elettra pe grafenă crescută pe Pt(001) monocristalină; se obțin lărgimi ale liniilor de 0,2 eV.

Intensitatea remarcabilă a radiației de sincrotron permite urmărirea *in situ* a anumitor procese (polarizare / depolarizare, reacții chimice, tranziții de fază). În Figura 5 prezentăm evidențierea prin spectroscopie de fotoelectroni a pierderii, respectiv revenirii polarizării la variația temperaturii. Fiecare spectru a durat cca. 10 secunde.

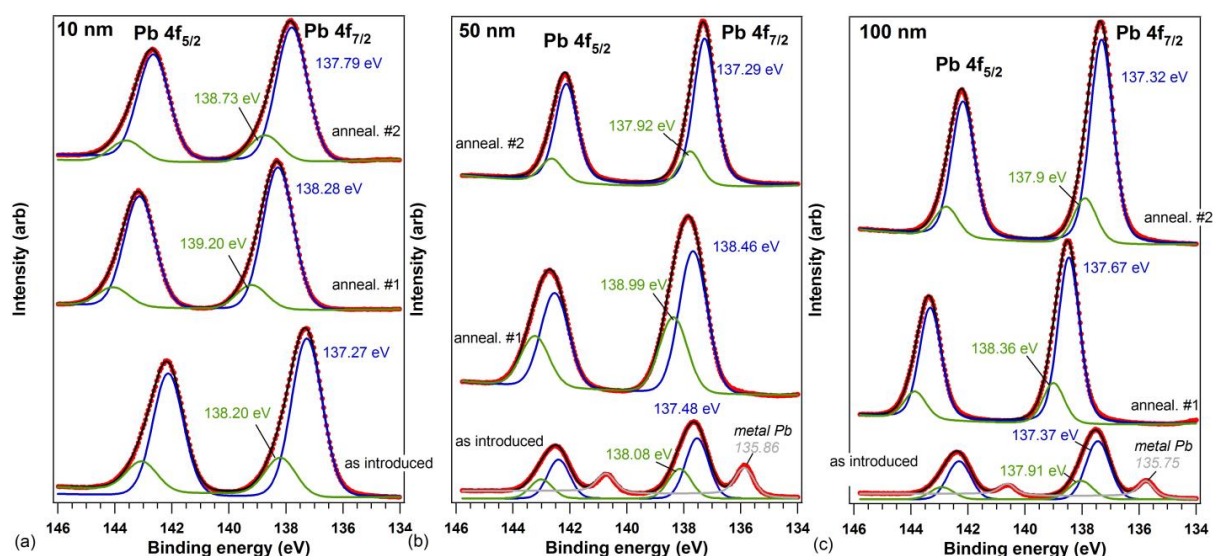


Figura 3. Spectre XPS ale Pb 4f măsurate pe straturi subțiri de 10 nm Pb(Zr,Ti)O₃(001) (a), 50 nm Pb(Zr,Ti)O₃(001) (b) și 100 nm Pb(Zr,Ti)O₃(001) (c) imediat după introducerea probei, după un prim tratament termic și după un al doilea tratament termic în atmosferă de oxigen. În cazul (a) s-a folosit sursa de laborator (radiația Al K α monocromatizată), cu un timp de achiziție de 5 s/punct. În cazurile (b,c) s-a folosit radiația de sincrotron cu energia de 260 eV și un timp de aciziție de 0,5 s/punct.

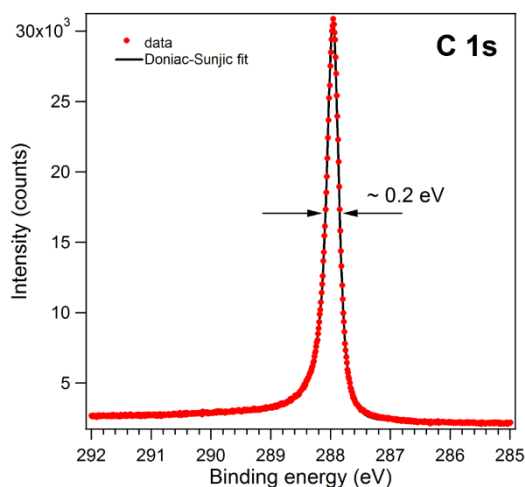


Figura 4. Spectru XPS al carbonului 1s măsurat pe un strat monoatomic de grafenă crescută pe un monocristal de Pt(001). Durata achiziției: 0,2 s/punct, 12 minute în total, cu un pas energetic foarte mic pentru XPS, 10 meV.

În aceste condiții, cuplarea instalației CoSMoS la linia de fascicul SuperESCA (sau la altă linie de fascicul similară la un sincrotron de generația a III-a) transformă spectroscopia de fotoelectroni dintr-o metodă standard de caracterizare într-o facilitate dinamică de sondare a proceselor tranzitorii din materia condensată.

Măsurători în timp real au fost utilizate și pentru a se monitoriza adsorbția și disocierea anumitor molecule (CO, NO) pe suprafețe feroelectrice, un domeniu abordat intens în ultimii ani și care ar putea conduce la reducerea semnificativă a costurilor catalizatorilor folosiți în industria automobilă. Alte avantaje al prezentei instalației CoSMoS la SuperESCA, chiar față de instalații de complexitate similară prezente la radiația de sincrotron, derivă din multiplele tehnici care sunt disponibile pe această instalație, difracția de electroni și în special microscopia cu efect tunel STM. Figura 6 prezintă un exemplu de imagini STM obținute cu rezoluție atomică în CoSMoS pe straturi de grafenă sintetizate pe Ir(111).

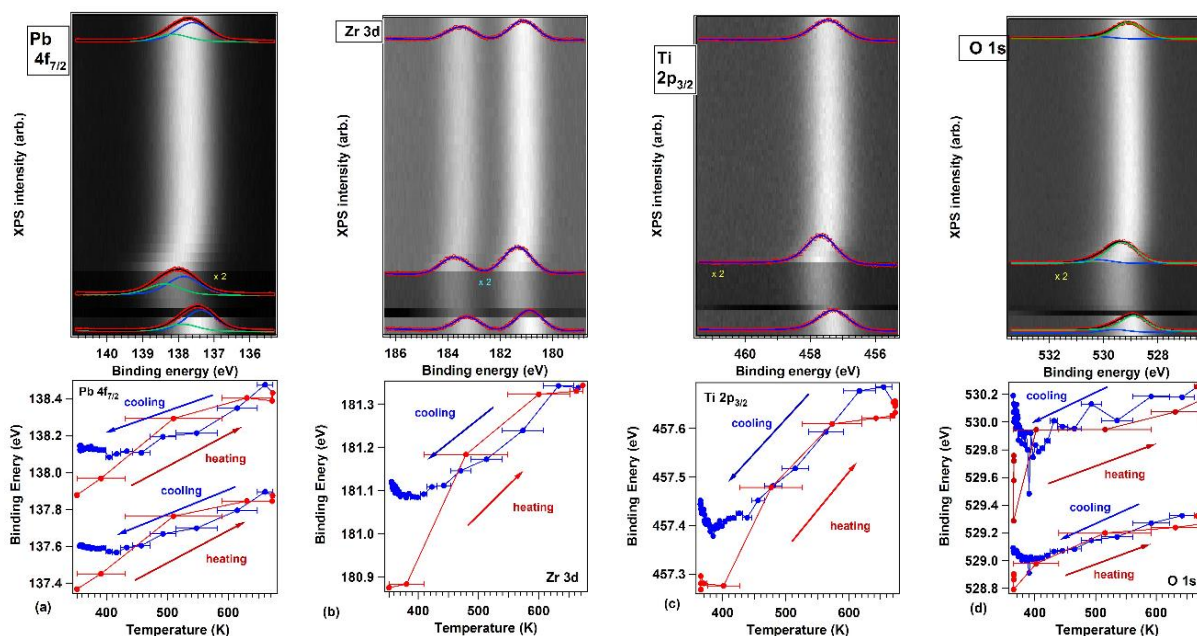


Figura 5. Monitorizarea prin spectroscopie XPS în timp real, cu rezoluție temporală de ordinul a 10 secunde, a tranziției de fază feroelectric → paraelectric → feroelectric pe un strat subțire de zircotitanat de plumb monocristalin. Graficele de tip imagine reprezintă spectrele suprapuse ca benzi orizontale, modulate în nuanțe de gri (albul reprezentând intensitatea maximă și negrul intensitatea minimă). Exemple tipice de spectre, precum și deconvoluțiile lor sunt prezentate pentru starea inițială (jos), la temperatura maximă de încălzire (la mijloc înspre jos) și după răcire (sus). În starea feroelectrică, proba are polarizarea orientată înspre interior și este caracterizată de energii de legătură mai scăzute. (a) nivelul Pb 4f_{7/2}; (b) dubletul Zr 3d; (c) nivelul Ti 2p_{3/2}; nivelul O 1s.

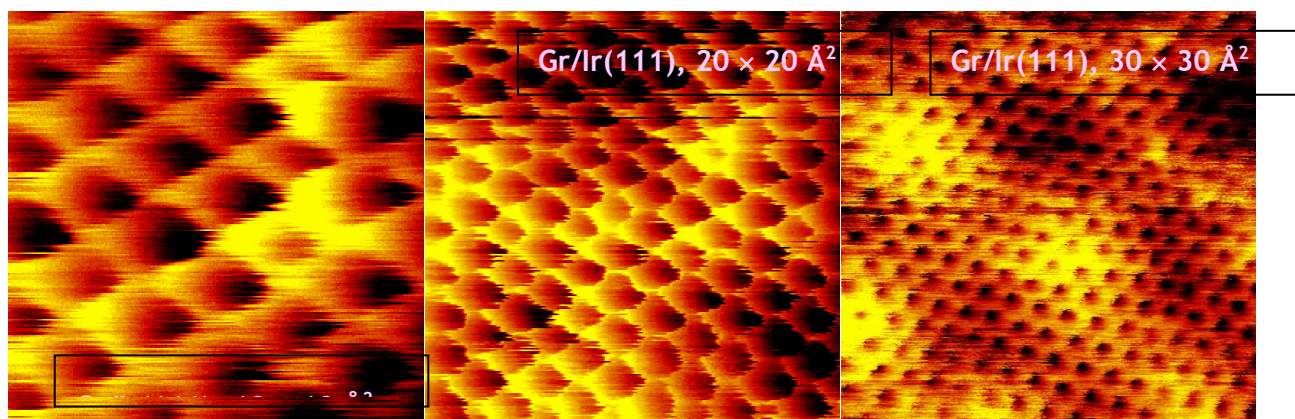


Figura 6. Imagini de microscopie de baleiaj cu efect tunel (STM) obținute pe un strat monoatomic de grafenă sintetizat prin CVD pe monocristal Ir(111).

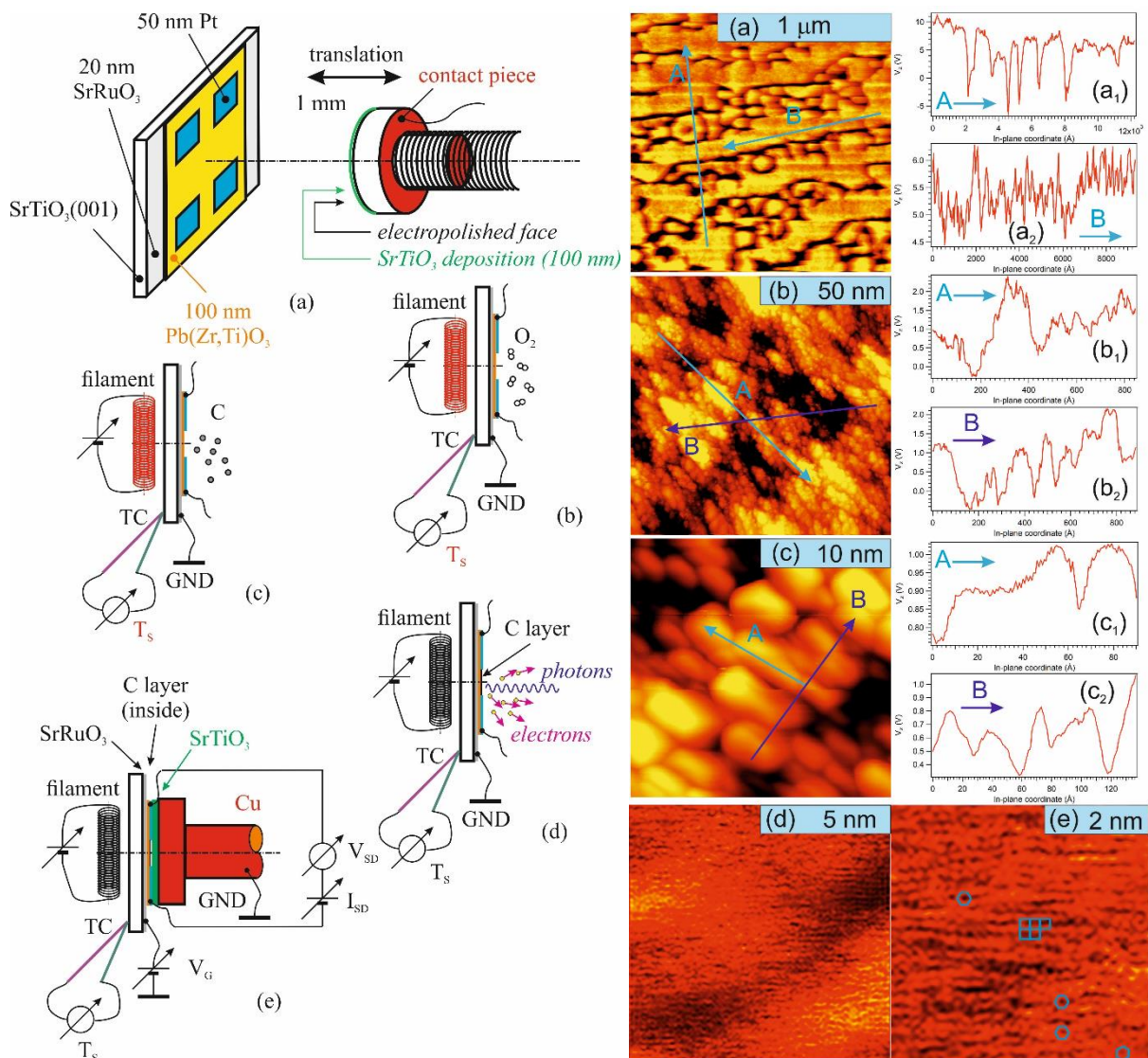


Figura 7. Stânga: Dispozitivul de testare și secvențele de analiză in situ a heterostructurii formate dintr-un substrat feroelectric, contacte sursă și drenă și un canal conductiv de grafenă sintetizat *in situ* pe substrat atomic curat. Dispozitivul permite curățarea substraturilor până la nivel atomic, analiza prin spectroscopie de fotoelectroni, absorbție de raze X, difracție de electroni și microscopie de baleiaj cu efect tunel, polarea substratului in situ folosind o electrodă amovibilă și măsurători de transport în plan pe probe cu polări diferite. Dreapta: analiza prin microscopie de baleiaj cu efect tunel.

După finalul proiectului de termen lung, partenerii italieni ne-au propus ca instalația CoSMoS să rămână conectată la linia de fascicul SuperESCA și s-a realizat un acord de cooperare în acest sens (anexat). Elettra va asigura anual timp de fascicul de 10 zile pe an sub statutul de „in-house research”, adică timp de fascicul în cadrul căruia putem efectua orice fel de experiențe, fără vreo aprobare prealabilă plus 12 zile pe an de timp de fascicul acordat propunerilor venind exclusiv de la echipe din România. Partea română se angajează să plătească în schimbul acestor servicii 60.000 Euro pe an, dintre care 45.000 Euro pentru finanțarea unui cercetător care să se ocupe de mentenanța instalației și să asigure suportul necesar utilizatorilor, iar 15.000 Euro pentru costurile recurente (electricitate, încălzire, gaze de lucru, acces la facilitățile generale). Aceasta revine la 2.727 Euro pe zi de fascicul care ar fi obținută în baza acestui acord, cca. 27 % din prețul la care se poate achiziționa timp de fascicul pe baze comerciale.

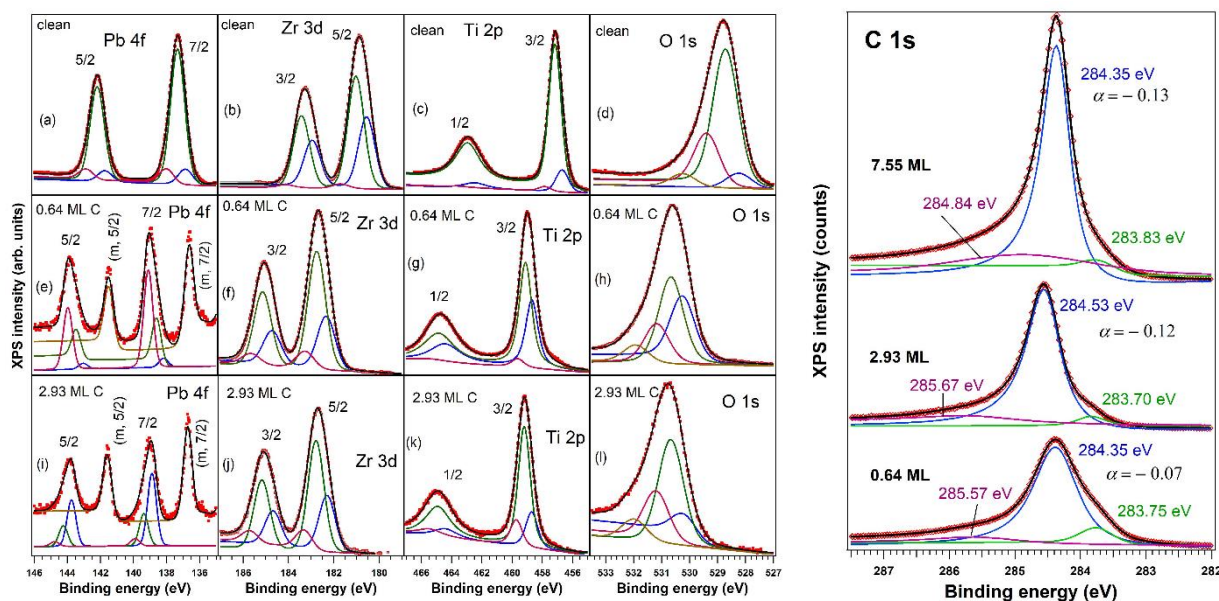


Figura 8. Spectroscopie de fotoelectroni de ultraînaltă rezoluție pentru heterostructurile sintetizate *in situ* folosind dispozitivul din figura anterioară.

Menționăm faptul că, în general, în 2 zile de fascicul se pot obține date de calitate mai bună comparate cu ceea ce se obține în cca. 2 luni în condiții standard de laborator, putând oferi posibilitatea publicării în reviste cu factor de impact de cca. 3 ori mai ridicat. Așadar, semnarea acestui acord permite României să obțină date pentru publicarea anuală a peste 10 articole în reviste cu factor de impact ridicat (spre 10). Se cunoaște faptul că în ultimii ani producția științifică a cercetării românești a crescut în mod continuu; cu toate acestea, la publicarea în reviste cu factor de impact ridicat suntem încă deficitari. INCDFM crește continuu procentul de publicații în reviste cu factor de impact ridicat, depășind 30 de astfel de publicații în 2019.

Rezultate recente au fost obținute în premieră mondială pe această instalație cuplându-se metodele de preparare tipice epitaxiei din fascicul molecular (MBE) cu difracția de electroni lenți (LEED), microscopia de baleiaj cu efect tunel (STM), spectroscopia de fotoelectroni de rapidă și de înaltă rezoluție, absorbția de raze X și măsurătorile de transport și de polarizare *in situ* pe un sistem-model de transistor cu efect de câmp cu canal grafenic și poartă feroelectrică, evidențiindu-se variații ale comportamentului histeretic al rezistenței dictate de polarizarea substratului (Figurile 7-9) pentru sisteme sintetizate pornind de la suprafețe atomic curate. Ansamblul care a rezultat este unic nu numai în România sau Italia, dar, din cunoștințele noastre nicio facilitate de radiație de sincrotron din lume (cca. 100, cu un număr mediu de 25 de posturi experimentale fiecare deserving câteva sute de utilizatori) nu are adaptată pe vreo linie de fascicul laolaltă o instalație de sinteze prin MBE, microscopie de baleiaj cu efect tunel și posibilități de polare materiale și de măsurători electrice *in situ*. La aceste facilități se adaugă și competențele excepționale în teoria solidului existente în INCDFM, care permit să se elaboreze noi modele și teorii într-un timp relativ rapid după obținerea noilor date experimentale. În acest caz particular, sinergia excelență experimentală - background teoretic a condus la explicarea pentru prima dată a fenomenelor de anti-histerezis ale dependenței rezistenței de polarizarea sustratului feroelectric, fenomen care până în acest moment era pus pe seama contaminanților, care au fost eliminați în experimentul derulat de echipele noastre.

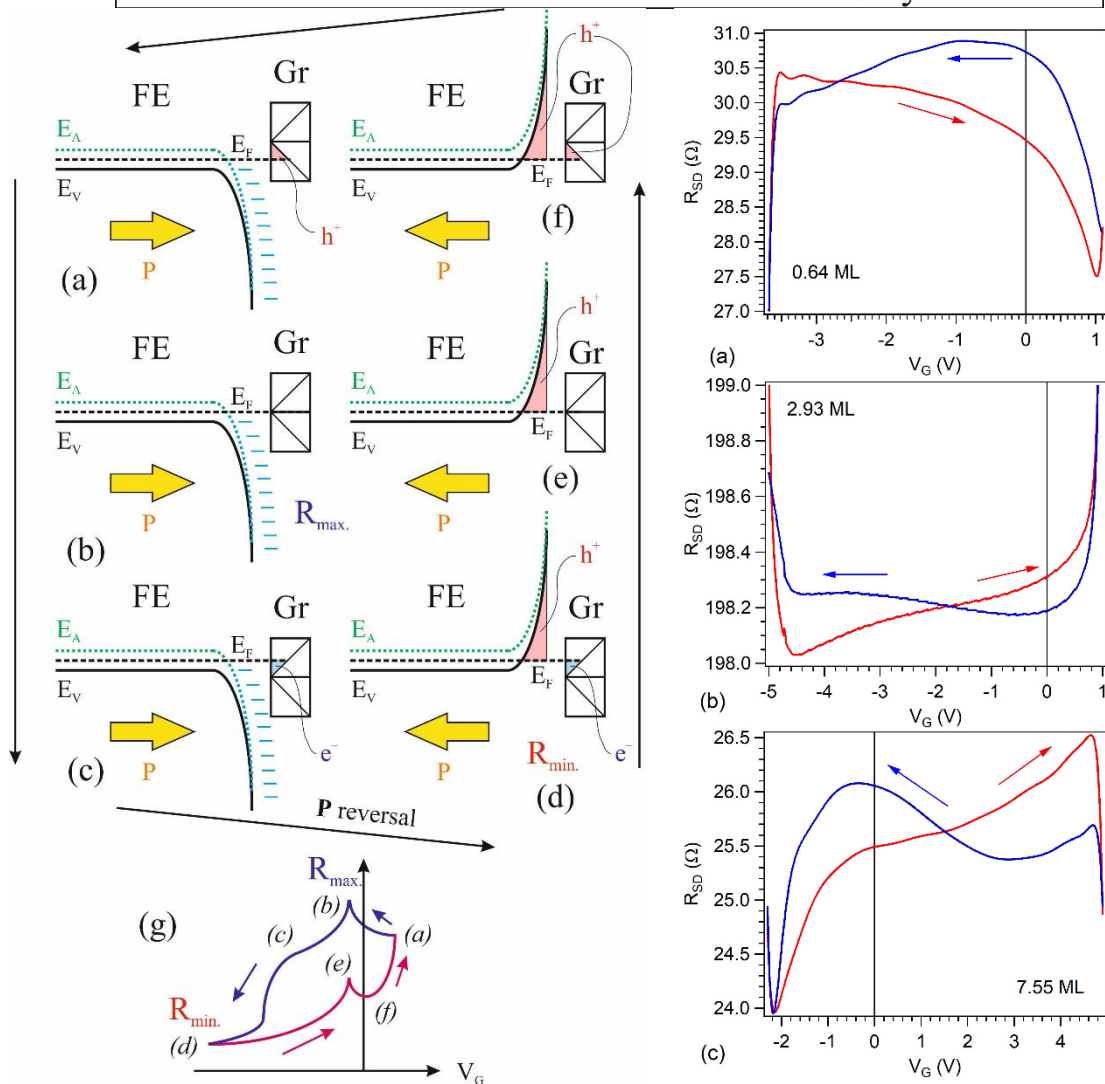
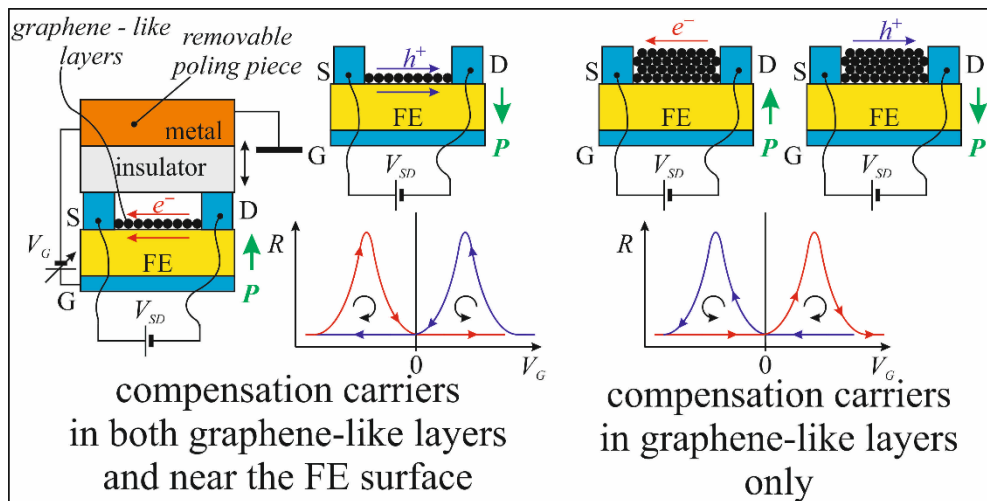


Figura 9. Sus: rezumat al structurilor sintetizate și al comportării hysteretice. Jos stânga: model pentru explicarea comportamentului anti-hysteretic în cazul straturilor subțiri de grafenă, incapabile să compenseze complet câmpul de depolarizare din substrat. Jos dreapta: curbe de histererez și anti-histererez obținute experimental, pentru grosimi diferite ale canalului grafenic.

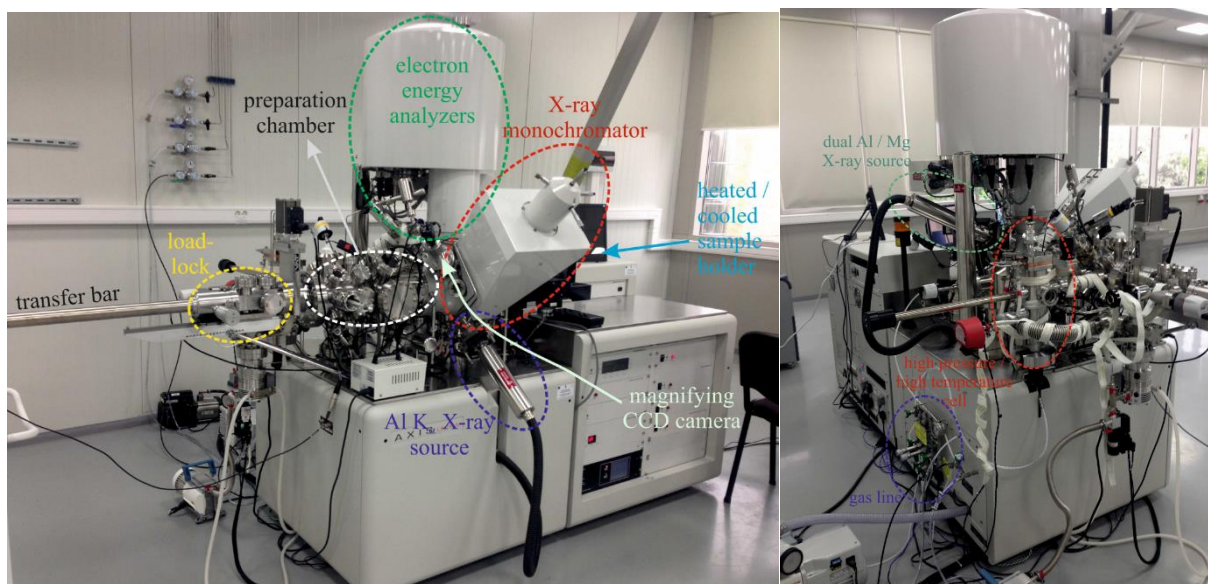


Figura 10. Instalația de spectroscopie de fotoelectroni cu posibilități de analiză pe arie microscopică și dotată cu celulă de tratare a probelor în condiții de presiune și temperatură ridicată (4 bar / 1000 °C). Fabricant: Kratos, Manchester, Marea Britanie.

Noua instalație XPS achiziționată în INCDFM în 2015 (Figura 10) a fost achiziționată în 2015 în cadrul unui proiect de fonduri structurale. Față de celelalte instalații cuprinse în Rețeaua Națională de instalații complexe de tip XPS/ESCA, aprobată prin H.G. nr. 786/2014, noua instalație prezintă următoarele diferențe esențiale:

a) Instalația conține, de fapt, două analizoare de electroni suprapuse, unul pentru spectroscopie de fotoelectroni de înaltă rezoluție (analizor semisferic) și al doilea pentru imagistică de fotoelectroni (analizor cu câmp întârziator, „retarding field analyzer”). Bascularea dintre cele două moduri de detecție este foarte rapidă și deci dispozitivele permit vizualizarea cu contrast chimic a probelor neomogene, precum și spectroscopia de fotoelectroni pe arie limitată, cu rezoluție de până la 2 μm. Acest dispozitiv este absolut necesar pentru probe neomogene, cum sunt cele mai multe probe care rezultă în urma procedurilor tehnologice, permițând analiza de mostre provenind din industrie și nu numai aceea a anumitor sisteme-model, omogene.

b) Instalația conține mai multe posibilități de introducere a probelor; se remarcă în principal suportul multiprobă, astfel încât până la 20 de probe pot fi introduse simultan în vederea analizei. Aceasta economisește mult din „timpii morți” necesari pentru degazarea fiecărei probe care sosește de la presiunea atmosferică. Modul de achiziție automatizat permite definirea prealabilă a probelor, a regiunilor analizate și a măsurătorilor care urmează a fi efectuate, astfel încât XPS devine o metodă care permite caracterizări de serie mare.

c) Instalația a fost livrată având cuplată o celulă pentru tratamente chimice *in situ*, permițând introducerea de gaze la presiuni de până la 4 bar (menționăm că măsurătoarea se efectuează la presiuni de ordinul a 10^{-9} mbar = 10^{-12} bar, așadar există 12-13 ordine de mărime între presiunea la care pot fi tratate probele și cea la care sunt măsurate). De asemenea, probele pot fi tratate în această cameră de reacție până la temperaturi de 1000 °C, în timp ce măsurătorile se pot efectua de la temperatura azotului lichid (- 196 °C) până la 600 °C.

d) Nu în ultimul rând, prin existența unei lentile magnetice de dirijare a electronilor, intensitatea pe probe similare furnizată de noua instalație este cu un factor 4-5 mai ridicată decât a celorlalte instalații (această lentilă magnetică afectează distribuția unghiulară a fotoelectronilor, de aceea ea n-a fost folosită pentru celelalte instalații).

Reamintim că această instalație este cea mai potrivită pentru a efectua analize pe scară largă pentru chimie, cataliză sau alte domenii industriale.

Rețeaua este constituită din următoarele instalații:

A1. Un cluster complex de știința suprafețelor și interfețelor (Specs, Fig. 2), conținând: (i) o instalație de măsurători prin spectroscopie de fotoelectroni (XPS, ESCA, UPS, AES); (ii) o

instalație de preparare a probelor prin epitaxie din fascicul molecular (MBE) dotată și cu posibilități de monitorizare prin difracție de electroni lenți (LEED) și rapizi (RHEED), spectroscopie de electroni Auger (AES) și analiza gazului din incintă prin spectrometrie de masă; (iii) o instalație de microscopie și spectroscopie de baleiaj cu efect tunel (STM/STS); (iv) sas de introducere rapidă a probelor și posibilități de stocare a acestora în ultravid.

A2. O instalație de spectroscopie de fotoelectroni cu posibilități de analiză pe arie restrânsă (rezoluție laterală 2 μm) și schimbarea automatizată a probelor / pozițiilor de măsură, cuplată la o celulă de reacție la temperatură și presiune ridicată (Kratos, Fig. 10).

A3. Un cluster complex de știința suprafețelor și interfețelor (Specs, Fig. 1), delocalizat pe linia de fascicul SuperESCA la facilitatea de radiație de sincrotron Elettra din Trieste (Combined Spectroscopy and Microscopy on a Synchrotron - CoSMoS), conținând: (i) o instalație de măsurători prin spectroscopie de fotoelectroni (XPS, ESCA, UPS, AES) cu rezoluție unghiulară și de spin (ARPES, XPD, ARUPS, SR-UPS); (ii) o instalație de preparare a probelor prin epitaxie din fascicul molecular (MBE) dotată și cu posibilități de monitorizare prin difracție de electroni lenți (LEED) și rapizi (RHEED) și prin spectroscopie de electroni Auger (AES) și analiza gazului din incintă prin spectrometrie de masă; (iii) o instalație de microscopie și spectroscopie de baleiaj cu efect tunel (STM/STS); (iv) sas de introducere rapidă a probelor și posibilități de stocare a acestora în ultravid. Acestei instalații i se alocă de la Elettra semestrial 5 zile de fascicul sincrotron în regimul de „in-house research”, plus 6 zile de fascicul pe bază de proiecte de cercetare, rezervate echipelor din România. În afara fasciculului sincrotron, experiențe de spectroscopie de fotoelectroni folosind surse convenționale, sau alte experiențe STM/STS, LEED, RHEED, Auger, etc. sunt posibile în orice moment, cu condiția deplasării personalului la Elettra.

A4. O instalație de microscopie de electroni lenți și de fotoelectroni: LEEM - PEEM, micro LEED, micro ARUPS (Specs).

2. STRUCTURA RAPORTULUI

2.1. INFORMAȚII PRIVIND UNITATEA DE CERCETARE-DEZVOLTARE

a. Denumire	Institutul Național de Cercetare-Dezvoltare pentru Fizica Materialelor
b. Statut juridic	Institut Național de Cercetare-Dezvoltare
c. Act de înființare	H. G. nr. 1312/1996
d. Modificări ulterioare	H. G. nr. 1400/2005, H. G. nr. 1006/2015
e. Director general/ Rector	CS I Dr. Ionuț Marius Enculescu
f. Adresă UCD	Str. Atomiştilor nr. 405A, 077125 Măgurele jud. Ilfov
g. Telefon	021-3690185
h. Fax	021-3690177
i. E-mail	director@infim.ro

2.2 INFORMAȚII PRIVIND INSTALAȚIA/ OBIECTIVUL DE INTERES NAȚIONAL

a. Responsabil IOSIN	CS I Dr. abil. Cristian Mihail Teodorescu	
b. Adresă	Str. Atomiştilor nr. 405A, 077125 Măgurele jud. Ilfov	
c. Telefon	0724-291045	
d. Fax	021-3690177	
e. E-mail	teodorescu@infim.ro	

2.3 VALOAREA INSTALAȚIEI/ OBIECTIVULUI DE INTERES NAȚIONAL

Lei

TOTAL		
din care:	Terenuri și amenajări spații	-
	Clădiri	-
	Echipamente și software	18.193.176,26
	Altele (menționați care)	-

2.4 SUPRAFAȚA INSTALAȚIEI/ OBIECTIVULUI DE INTERES NAȚIONAL

MP

TOTAL TERENURI		344,78
din care:	Teren	-
	Amenajare spații verzi	-
	Drumuri de acces betonate și asfaltate	-
	Platforme betonate și asfaltate	-
TOTAL CLĂDIRI		
din care:	Birouri	82,08
	Spații tehnologice (hale, anexe - se va menționa)	-
	Vestiare, grupuri sanitare, holuri	-
	Laboratoare, ateliere	262,70
	Săli conferințe	-

2.5 DEVIZ POST-CALCUL PENTRU ANUL 2021

Lei

Nr.crt.	explicații (capitol/categorie de cheltuieli)	TOTAL
1	Cheltuieli cu personalul, din care:	349.158,00
1.1	Salarii directe	341.476,00
1.2	Contribuția asiguratorie de muncă (CAM)	7.682,00
2	Cheltuieli cu materiile prime și materialele, din care:	443.664,37
2.1	Cheltuieli cu materiile prime	68.741,45
2.2	Cheltuieli cu materialele consumabile, inclusiv materialele auxiliare, combustibili utilizați direct pentru IOSIN, piese de schimb	374.922,92
2.3	Cheltuieli privind obiectele de inventar	-

Nr.crt.	explicații (capitol/categorie de cheltuieli)	TOTAL
2.4	Cheltuieli privind materialele nestocate	-
2.5	Cheltuieli cu energia, apa și gazele utilizate direct pentru IOSIN	-
3	Cheltuieli cu serviciile prestate de terți, din care:	335.350,63
3.1	Cheltuieli cu întreținerea și reparațiile, inclusiv amenajarea spațiilor	11.880,96
3.2	Cheltuieli cu redevențe, locații de gestiune și chirii	-
3.3	Cheltuieli cu transportul de bunuri	2.577,67
3.4	Cheltuieli cu servicii pentru teste, analize, măsurători etc	-
3.5	Cheltuieli cu servicii informatice	-
3.6	Cheltuieli cu servicii de expertiză, evaluare, asistență tehnică etc	-
3.7	Cheltuieli cu servicii de întreținere a echipamentelor	-
3.8	Cheltuieli cu alte servicii strict necesare pentru IOSIN	320.892,00
	Sub-total I (1+2)	792.822,37
	Sub-total II (1+2+3)	1.128.173
4	Cheltuieli cu regia (17,9 % aplicabil la Sub-total I)	141.827,00
	TOTAL CHELTUIELI (1+2+3+4)	1.270.000,00

2.6 DEVIZ ANTECALCUL ESTIMATIV PENTRU ANUL 2022

Lei

Nr.crt.	explicații (capitol/categorie de cheltuieli)	TOTAL
1	Cheltuieli cu personalul, din care:	1.960.133
1.1	Salarii directe	1.917.000
1.2	Contribuția asiguratorie de muncă (CAM)	43.133
2	Cheltuieli cu materiile prime și materialele, din care:	83.000
2.1	Cheltuieli cu materiile prime	23.000

Nr.crt.	explicații (capitol/categorie de cheltuieli)	TOTAL
2.2	Cheltuieli cu materialele consumabile, inclusiv materialele auxiliare, combustibili utilizați direct pentru IOSIN, piese de schimb	40.000
2.3	Cheltuieli privind obiectele de inventar	20.000
2.4	Cheltuieli privind materialele nestocate	-
2.5	Cheltuieli cu energia, apa și gazele utilizate direct pentru IOSIN	-
3	Cheltuieli cu serviciile prestate de terți, din care:	400.000
3.1	Cheltuieli cu întreținerea și reparațiile, inclusiv amenajarea spațiilor	15.000
3.2	Cheltuieli cu redevențe, locații de gestiune și chirii	-
3.3	Cheltuieli cu transportul de bunuri	-
3.4	Cheltuieli cu servicii pentru teste, analize, măsurători etc	-
3.5	Cheltuieli cu servicii informatice	-
3.6	Cheltuieli cu servicii de expertiză, evaluare, asistență tehnică etc	-
3.7	Cheltuieli cu servicii de întreținere a echipamentelor	60.000
3.8	Cheltuieli cu alte servicii strict necesare pentru IOSIN	325.000
	Sub-total I (1+2)	2.000.000
	Sub-total II (1+2+3)	2.400.000
4	Cheltuieli cu regia (20 % aplicabil la Sub-total I)	400.000
	TOTAL CHELTUIELI (1+2+3+4)	2.800.000

2.7 RELEVANȚA

Spectroscopia de fotoelectroni și știința suprafețelor. Spectroscopia de fotoelectroni se bazează pe efectul fotoelectric (Albert Einstein, 1905; Premiul Nobel pentru fizică, 1921) care a statuat prima dată în mod definitiv natura corpusculară a luminii. Primele experimente de efect fotoelectric au fost efectuate cu radiație ultraviolet, extrăgându-se electroni din benzile externe ale materialelor. Fotoni mai energetici sunt capabili să extragă electroni de pe pături atomice mai profunde, iar prin analiza acestor electroni se pot deduce stările de ionizare și înconjurarea atomilor de unde provin acești electroni. Această tehnică nu a putut fi pusă în aplicare până când nu au existat surse de radiație X monocromatică și aparatură electronică de înaltă tensiune cu stabilitate remarcabilă (de ordinul milivolților pentru tensiuni aplicate de ordinul kilovolților). Eforturi continue de a se optimiza Spectroscopia de fotoelectroni [provenind din pături electronice interne] excitați folosindu-se radiație X (X-ray photoelectron spectroscopy, XPS, sau Electronic structure for chemical analysis, ESCA) au fost încununat de acordarea premiului Nobel pentru fizică în 1981 lui Kai Siegbahn. Metoda XPS a contribuit ulterior decisiv la cercetările de chimia suprafeței ale lui Gerhard Ertl (premiul Nobel pentru chimie în 2007), multistraturile cu magnetorezistență gigant ale lui Albert Fert (premiul Nobel pentru Fizică în 2007), spectroscopia de fotoelectroni din banda de valență a validat structura electronică a grafenei (Andre Geim, Konstantin Novoselov, premiul Nobel pentru fizică 2010), tehnici de știința suprafeței au fost esențiale pentru noile diode

luminescente (Isamu Akasaki, Hiroshi Amano, Shuji Nakamura, premiul Nobel pentru fizică 2014).

Față de alte metode de caracterizare, XPS/ESCA are următoarele caracteristici:

(a) Energiile de legătură ale electronilor în păturile atomice interne depind de starea de ionizare a atomilor respectivi și de tipul de legături chimice formate de acești atomi. Metoda permite deci caracterizarea compozițională și identificarea compușilor chimici.

(b) Parcurusul liber mediu al fotoelectronilor prin material este de ordinul nanometrilor, deci metoda caracterizează materialul aproape în exclusivitate în vecinătatea suprafeței acestuia. De aceea, metoda XPS/ESCA nu a putut fi implementată până când nu s-a dezvoltat și tehnologia vidului ultraînalt (ultrahigh vacuum, UHV), care corespunde unor presiuni ale gazului rezidual de sub 10^{-7} Pa (10^{-9} mbar), pentru asigurarea curățeniei probelor în timpul măsurătorii.

Așadar, odată cu metoda XPS/ESCA, au înflorit și studiile suprafețelor sau ale interfețelor la scară nanometrică sau sub-nanometrică. Instalațiile moderne de științe ale suprafețelor suplimentează metoda XPS/ESCA cu alte metode de caracterizare structurală, prin difracție de electroni (low energy electron diffraction, LEED, sau reflection high energy electron diffraction, RHEED), spectroscopie de electroni Auger (AES) pentru determinări esențialmente compoziționale, microscopie atomică de forță (atomic force microscopy, AFM) sau microscopie de baleiaj cu efect tunel (scanning tunneling microscopy, STM, Gerd Binnig, Heinrich Rohrer, premiul Nobel pentru fizică 1986) care permit vizualizarea atomilor individuali, împreună cu facilități de preparare *in situ*, în condiții de ultravid, a suprafețelor sau a straturilor subțiri. Aceste metode s-au dezvoltat de pe la mijlocul deceniului al nouălea din secolul trecut. S-a realizat că foarte multe procese de importanță tehnologică: fricțiunea, coroziunea, cataliza, fotocataliza, procesele fotovoltaiice, magnetismul, optoelectronica - nu pot fi explicate în totalitate decât dacă se caracterizează cât mai exhaustiv suprafețele și interfețele, spectroscopia de fotoelectroni fiind una din tehnicile favorite.

Există în momentul de față grupuri mari de știința suprafețelor în lume, precum și reviste notabile dedicate: ACS Applied Materials and Interfaces, Advanced Materials: Interfaces, Surface Science Reports, Surface Science, Applied Surface Science, Surface and Interface Analysis, Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena, Physical Review B etc.

(c) Spectroscopia de fotoelectroni din banda de valență permite determinarea experimentală a structurii electronice a solidelor monocristaline, în special a densităților de stări și a legilor de dispersie ale purtătorilor de sarcină $E(\mathbf{k})$, folosindu-se distribuția unghiulară a fotoelectronilor excitați cu radiație ultraviolet (angle resolved ultraviolet photoelectron spectroscopy, ARUPS). Se poate detecta și distribuția fotoelectronilor cu rezoluție de spin, având acces la structura de bandă a solidelor magnetice pentru fiecare orientare a spinului față de axa magnetizării.

(d) Analizându-se distribuția unghiulară a fotoelectronilor din XPS, se pot deduce geometriile suprafețelor sau modul de inserare a impurităților într-un solid monocristalin, metoda având și denumirea de difracție de fotoelectroni (X-ray photoelectron diffraction).

(e) Poziția nivelurilor profunde în vecinătatea suprafețelor și interfețelor este afectată de curburile de bandă din aceste zone datorate contactelor între materiale diferite sau polarizării feroelectrice. Astfel, XPS poate cuantifica curburile de bandă. Echipa din INCDMF este printre primele din lume care au validat această metodă pentru materiale feroelectrice.

(f) În ultimii ani, spectroscopia de fotoelectroni a început să fie suplimentată cu abilități de rezoluție spațială sub-micronică, dezvoltându-se metode care au fost denumite ESCA Microscopy, NanoESCA, Photoelectron SpectroMicroscopy sau Photoelectron Microscopy (PEEM).

2.8 STRUCTURA UTILIZATORILOR

În marea lor majoritate, echipe de cercetare din străinătate și din țară. SE fac eforturi pentru atragerea, pe viitor, a câtor mai mulți operatori economici.

2.9 INFORMAȚII PRIVIND ACCESUL LA IOSIN

- Descrierea tipului de acces: local, virtual (modul de reglementare al accesului, precum și modul de informare a publicului privind accesul la instalație)
- Politica pentru acordarea priorității de acces pentru utilizatori/ beneficiari

(extras din Regulamentul de acces, aprobat de conducerea INCDFM)

B. Modalități de acces

B1. Accesul pe bază de contracte economice.

a. Beneficiarul ia legătura cu directorul IOSIN sau cu unul dintre responsabilii instalațiilor specifice, în cazul în care s-a decis care instalație este optimă pentru necesitățile sale. Beneficiarul este rugat să facă o scurtă descriere (½ pagină) a necesităților experimentale, în special să precizeze numărul de probe, concentrațiile elementelor pe care le dorește analizate etc.

b. Împreună cu directorul IOSIN sau cu unul dintre responsabilii de instalații, se estimează cuantumul de timp necesar pentru experiențele în chestiune. Prețul estimativ pentru o oră de experiențe este 100 Euro fără TVA. Pe baza estimării dinainte, IOSIN emite o ofertă de preț pentru analizele solicitate, inclusiv pentru partea de interpretare, dacă este cazul.

c. În cazul acceptării ofertei sau, eventual, în urma negocierii ei (de exemplu, a reducerii sau suplimentării numărului de probe / analize), Beneficiarul emite o comandă fermă pentru măsurătorile solicitate. IOSIN acceptă comanda și efectuează experiențele propuse, cu sau fără sprijin logistic sau de capital uman din partea Beneficiarului. Emiterea facturii se face concomitent cu predarea rezultatului analizei, iar plata se face în termen de max. 30 zile de la această dată.

B2. Accesul pe bază de proiecte (parteneriate) în curs

a. Beneficiarul trimite directorului IOSIN sau unuia dintre responsabilii de instalație o scurtă descriere (1 pagină) a experiențelor propuse, incluzând rezultate preliminare și obiective urmărite, cu menționarea proiectului în curs și a valorii transferului de manoperă către salariații care vor efectua experiențele.

b. Directorul IOSIN sau responsabilul de instalație avizează propunerea, cu eventuale amendamente legate de aspecte financiare sau de manoperă necesară. Experiențele / interpretările sunt efectuate, iar Serviciul Postcalcul INCDFM ia în considerație transferurile de manoperă necesare.

c. Pentru experiențe care țin de Programul Nucleu al INCDFM, nu se mai efectuează transferul de manoperă, însă aceste experiențe vor fi avizate numai de directorul IOSIN, cu informarea conducerii INCDFM.

B3. Accesul pe bază de proiecte științifice, fără implicații financiare

a. Acest acces este rezervat în special echipelor care au dovedit o bună exploatare a rezultatelor experiențelor efectuate în lucrări publicate în reviste de prestigiu, cu respectarea normelor deontologice privind co-autoratul acestor lucrări, deci echipelor care au un istoric de colaborare cu grupul IOSIN pe aceste metode experimentale.

b. Accesul se face pe baza unui mini-proiect (2 pagini) în care se descrie pe scurt (i) stadiul actual al problematicei științifice, (ii) rezultate estimate; (iii) necesarul experimental (instalație / manoperă / timp alocat), (iv) dacă rezultatele vor fi incluse în dizertații de masterat sau teze de doctorat - precum și orice alte aspecte care pot influența pozitiv evaluarea mini-proiectului.

c. Proiectul este analizat în termen de max. 7 zile de directorul IOSIN, împreună cu responsabilul de instalație și cu cercetătorii care doresc să participe la experiment și este admis, renegociat (în sensul redefinirii efortului necesar) sau respins.

d. În cazul admiterii mini-proiectului, experiențele se efectuează cu sau fără sprijin logistic și în capital uman al Beneficiarului.

B4. Accesul la primele experiențe

Se admit solicitări și din partea unor echipe noi, cu care nu există un istoric de colaborare, nici proiecte în parteneriat, nici contracte economice, tot pe bază de mini-proiect (2 pagini), la care se atașează și un CV și lista de lucrări ISI ale propunătorului. Numărul de probe / timp alocat în acest caz va fi mai redus decât în cadrul colaborărilor de tip B3, iar Beneficiarul va trebui să dovedească faptul că are capacitatea de a realiza lucrări în reviste cu factor convenabil de impact pe baza rezultatelor livrate, înainte de a putea accede din nou IOSIN sub forma de colaborări de tip B3.

B5. Experiențe proprii ale grupului

Aceste experiențe se vor efectua tot pe bază de mini-proiect: 1 pagină în cazul realizării unor proiecte câștigate de grup și 2 pagini în cazul unor experiențe care nu au finanțare expresă, însă care prezintă un interes științific ridicat, iar acceptarea lor este decisă, de comun acord, de directorul IOSIN, de responsabilul de instalație și de toți membrii echipei implicați în cercetările respective.

Solicitările se transmit în format electronic și se arhivează de către Secretar, cu număr de înregistrare în formatul Bx/număr/data. Solicitățile primite de director sau de responsabilii de instalații, de asemenea, se trimit Secretarului pentru arhivare. Corespondența ulterioară privind fiecare solicitare, de asemenea, se arhivează în formatul Bx/număr-Cj/data (cu j = 1, 2, ...) În cazul unor negocieri privind realizarea experiențelor, se redactează un proces-verbal, care se arhivează în formatul Bx/număr-PVj/data (cu j = 1, 2, ...). Numărul de înregistrare al fiecărei solicitări va fi marcat în caietele de laborator și în folder-ele de date corespunzătoare fiecărui experiment.

În cazul în care se solicită timp de fascicul în radiație de sincrotron (instalația A3), responsabilii Clusterului CoSMoS asistă Beneficiarul în redactarea propunerii pentru obținerea timpului de fascicul la radiația de sincrotron. Acest efort, numai în cazul acceptării propunerii de experimente folosind radiația de sincrotron, va fi inclus în manopera care se decontează din contractul economic (B1) sau parteneriatul (B2) care finanțează cercetările.

În ultima săptămână a fiecărei luni, se realizează programarea experiențelor care vor fi efectuate pe toate cele 5 instalații în decursul lunii următoare, prioritățile fiind, în ordine, colaborările de tip B1, B2, B3, B4, B5. În cazul apariției unor defecțiuni, experiențele acceptate se reprogramează. Programarea se arhivează, se afișează pe pagina web a grupului și la fiecare dintre cele 5 instalații.

2.10 LISTA UTILIZATORILOR

Operatori economici, internațional

1. CytoViva, Inc., 570 Devall Drive Suite 301, Auburn, AL 36832, USA

UCD, internațional

1. Instituto Universitario De Tecnología Química, Universitat Politècnica De Valencia-Consejo Superior De Investigaciones Científicas, Universidad Politècnica De Valencia, Av. De Los Naranjos s/n, 46022 Valencia, Spain

2. Institut de Ciència de Materials de Barcelona, ICMAB-CSIC, Campus UAB, Bellaterra, Catalonia 08193, Spain

3. Applied Physics Department, Barcelona University, Martí i Franquès, 1, 08028 Barcelona, Spain
4. ALBA Synchrotron, Carrer de la Llum, 2-26, 08290 Cerdanyola del Vallès, Spain
5. Elettra Sincrotrone Trieste, S.S. 14 - km 163, 5, Area Science Park, 34169 Basovizza, Trieste, Italy
6. Université Grenoble Alpes, CEA, LETI, Grenoble, France
7. Université de Lyon, Ecole Centrale de Lyon, INL CNRS UMR 5270, 36 avenue Guy de Collongue, F-69134 Ecully cedex, France
8. Department of Civil Engineering and Environment, Université d'Orléans, ISTO, UMR 7327 CNRS, 1A Rue de la Férollerie, 45071 Orléans, France
9. Univ. Lille, CNRS, Centrale Lille, Univ. Artois, UMR 8181–UCCS–Unité de Catalyse et Chimie du Solide, F-59000 Lille, France
10. Institut für Theoretische Physik, GoetheUniversität Frankfurt am Main, 60438 Frankfurt am Main, Germany
11. Institute of Physics and Astronomy, Aarhus University, 8000 Aarhus, Denmark
12. Department of Energy Conversion and Storage, Technical University of Denmark, 2800 Kgs. Lyngby, Denmark
13. Department of Physics and Astronomy, Uppsala University, 5120 Uppsala, Sweden
14. Section of Pharmacognosy and Chemistry of Natural Products, Department of Pharmacy, National and Kapodistrian University of Athens, Panepistimiopolis Zografou, Athens 15771, Greece
15. CICECO–Aveiro Institute of Materials, Department of Materials and Ceramics Engineering, University of Aveiro, 3810-193, Aveiro, Portugal
16. Department of Chemical Sciences, University of Limerick, Limerick V94 T9PX, Ireland
17. Bernal Institute, University of Limerick, Limerick V94 T9PX, Ireland
18. Swiss Light Source, Paul Scherrer Institute, 5232 Villigen-PSI, Switzerland
19. Scientific Center for Optical and Electron Microscopy, ETH Zürich, Zürich, Switzerland
20. School of Engineering, London South Bank University, 103 Borough Road, London SE1 0AA, United Kingdom
21. School of Life Health & Chemical Sciences, Open University, Walton Hall, Milton Keynes MK7 6AA, United Kingdom
22. Cardiff Catalysis Institute, School of Chemistry, Cardiff University, Park Place, Cardiff CF10 3AT, United Kingdom
23. Advanced Materials Research Group, Faculty of Engineering, University of Nottingham, NG7 2RD, United Kingdom
24. Beijing National Laboratory for Condensed Matter Physics, Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China
25. RIKEN Center for Emergent Matter Science, Wako, Saitama 351-0198, Japan
26. Department of Applied Physics, University of Tokyo, Tokyo 113-8656, Japan
27. Energy Materials and Devices Division, CSIR–Central Glass and Ceramic Research Institute, Kolkata 700 032, India
28. Glass Division, CSIR-Central Glass and Ceramic Research Institute, Kolkata, India
29. Department of Mechanical Engineering Science, University of Johannesburg, Cnr Kingsway and University Roads, Auckland Park, Johannesburg 2092, South Africa
30. Laboratory of Materials and Subatomics Physics, Faculty of Sciences, Ibn Tofail University, 14000, Campus Universitaire, 14000 Kenitra, Morocco
31. Laboratory of Advanced Materials and Processes Engineering, Faculty of Sciences, Ibn Tofail University, Campus Universitaire, 14000 Kenitra, Morocco

32. Laboratory of Materials and Environment Engineering: Modeling and Application, Department of Chemistry, Ibn Tofail University, 14000 Kenitra, Morocco
33. Laboratory of Inorganic and Organic Materials Physics and Chemistry, Materials Science Center, École Normale Supérieure, Mohammed V University, Avenue Mohamed Bel Hassan El Ouazzani, 10200 Rabat, Morocco

Operatori economici, național

1. Pro-Vitam Ltd., Muncitorilor Street 16, Sfantu Gheorghe, Romania
2. MGM Star Construct Ltd., Pancota St., 022773, Bucharest, Romania

UCD, național

1. Department of Microbiology, Faculty of Biology, University of Bucharest, Intr. Portocalelor no 1-3, 060101 Bucharest, Romania
2. Life, Environmental and Earth Sciences Division, Research Institute of the University of Bucharest (ICUB), University of Bucharest, 060023 Bucharest, Romania
3. Microbiology Department, Faculty of Biology, University of Bucharest, 1-3 Portocalelor Lane, 77206 Bucharest, Romania
4. Faculty of Biology, Research Institute, University of Bucharest, Soseaua Paduri 90-92, 50663 Bucharest, Romania
5. Department of Organic Chemistry, Biochemistry & Catalysis, Faculty of Chemistry, University of Bucharest, Bdul Regina Elisabeta 4-12, 030016 Bucharest, Romania
6. Department of Physical Chemistry, Faculty of Chemistry, University of Bucharest, Bdul Regina Elisabeta 4-12, 030016 Bucharest, Romania
7. Department of Chemistry, University of Bucharest, B-dul Regina Elisabeta, Nr. 4-12, 030018 Bucharest, Romania
8. Faculty of Physics, University of Bucharest, Atomistilor 405, 077125 Magurele, Romania
9. Center for Surface Science and Nanotechnology, University Politehnica of Bucharest, 313 Splaiul Independentei, 060042 Bucharest, Romania
10. National Centre for Micro and Nanomaterials, University Politehnica of Bucharest, 060042 Bucharest, Romania
11. Faculty of Applied Chemistry and Materials Science, University Politehnica of Bucharest, Splaiul Independenței no 313, 060042 Bucharest, Romania
12. Inorganic Chemistry, Physical Chemistry and Electrochemistry Department, Faculty of Applied Chemistry and Materials Science, University POLITEHNICA of Bucharest, Gh. Polizu Street, No. 1-7, 011061 Bucharest, Romania
13. University "Politehnica" of Bucharest, Faculty of Applied Chemistry and Material Science, Department of Oxide Materials and Nanomaterials, No. 1-7 Gh. Polizu Street, 011061, Bucharest, Romania
14. National Research Center for Micro and Nanomaterials, Faculty of Applied Chemistry and Materials Science, University POLITEHNICA of Bucharest, Splaiul Independentei Street, No. 313, 060042 Bucharest, Romania
15. Center for Microscopy-Microanalysis and Information Processing, University Politehnica of Bucharest, 313 Splaiul Independentei, 060042 Bucharest, Romania
16. Faculty of Power Engineering, Politehnica University of Bucharest, 060042 Bucharest, Romania
17. Department of Mechanics, University Politehnica of Bucharest, BN 002, 313 Splaiul Independentei, Sector 6, 060042 Bucharest, Romania

18. Faculty of Horticulture, University of Agronomic Sciences and Veterinary Medicine, 59 Marasti Blvd., 011464 Bucharest, Romania
19. “Alexandru Ioan Cuza” University, Faculty of Biology, 20A Carol I Blvd, 700505 Iasi, Romania
20. Faculty of Physics, “Babeş-Bolyai” University, Mihail Kogălniceanu 1, 400084 Cluj-Napoca, Romania
21. Department of Chemical Engineering, Faculty of Chemistry and Chemical Engineering, “Babes-Bolyai” University, Arany Janos 11, 400028 Cluj-Napoca, Romania
22. Department of Surgery, Carol Davila University of Medicine and Pharmacy, 8 Eroii Sanitari, Sector 5, 050474 Bucharest, Romania
23. Faculty of Veterinary Medicine, University of Agronomic Sciences and Veterinary Medicine of Bucharest, 105 Splaiul Independentei, Sector 5, 050097 Bucharest, Romania
24. “Alexandru Ioan Cuza” Police Academy, Fire Officers Faculty, Morarilor Str. 3, 022451 Bucharest, Romania
25. Faculty of Exact Sciences & Engineering, Hyperion University of Bucharest, 169 Calea Călăraşi, 030615 Bucharest, Romania
26. Academy of Romanian Scientists, 54 Spaiul Independentei, 050094 Bucharest, Romania
27. Biological Sciences Division, The Romanian Academy, 25, Calea Victoriei, Sector 1, District 1, 010071 Bucharest, Romania
28. National R&D Institute for Food Bioresources—IBA Bucharest, 5 Ancuța Băneasa Street, 020323 Bucharest, Romania
29. Laboratory of Functional Dyes and Related Materials, National Institute for Research & Development in Chemistry and Petrochemistry—ICECHIM, 202 Splaiul Independentei, 6th District, 060021 Bucharest, Romania
30. National Research and Development Institute for Chemistry and Petrochemistry -ICECHIM, 202 Splaiul Independentei, 060021 Bucharest, Romania
31. Institute of Physical Chemistry “Ilie Murgulescu”, Romanian Academy, Splaiul Independentei 202, 060021 Bucharest, Romania
32. Department of Surfaces and Interfaces, National Institute of Materials Physics, Atomistilor 405A, 077125 Magurele, Romania
33. “Victor Babes” National Institute of Research and Development in Pathology and Biomedical Sciences, Bucharest, RO, 050096, Romania
34. National Institute for Chemical Pharmaceutical Research and Development, Bucharest, RO, 031299, Romania
35. National Institute for Lasers, Plasma and Radiation Physics, 409 Atomistilor Street, P.O. Box MG-36, 077125, Magurele, Romania
36. National Institute of Research and Development for Optoelectronics, 409 Atomistilor St., 077125 Magurele, Romania
37. “IlieMurgulescu” Institute of Physical Chemistry of the Romanian Academy, 202 Splaiul Independentei, 060021 Bucharest, Romania
38. National Institute for Cryogenics and Isotopic Technologies ICSI-Rm. Valcea, ICSI Energy, Uzinei Street, No. 4, 240050 Ramnicu Valcea, Romania
39. “Stefan S Nicolau” Institute of Virology, Romanian Academy, 030304 Bucharest, Romania
40. Hadron Physics Department, National Institute for Physics and Nuclear Engineering - IFIN-HH, P.O. Box MG-6, Bucharest-Magurele, Romania
41. Multipurpose IrradiationCentre, National Institute for Physics and Nuclear Engineering - IFIN-HH, P.O. Box MG-6, Bucharest-Magurele, Romania
42. Applied Nuclear Physics Department, National Institute for Physics and Nuclear Engineering - IFIN-HH, P.O. Box MG-6, Bucharest-Magurele, Romania
43. Institute of Solid Mechanics, Romanian Academy, 15 Constatin Mille, 010141, Bucharest, Romania

44. Department of Functional Structures, National Institute of Materials Physics, Atomistilor 405A, 077125 Magurele, Romania
45. Department of Complex Heterostructures and Oxide Materials with Perovskite structure, National Institute of Materials Physics, Atomistilor 405A, 077125 Magurele, Romania
46. Department of Magnetism and Superconductivity, National Institute of Materials Physics, Atomistilor 405A, 077125 Magurele, Romania
47. Department of Optical Processes in Nanostructured Materials, National Institute of Materials Physics, Atomistilor 405A, 077125 Magurele, Romania
48. Department of Atomic Structure and Defects in Advanced Materials, National Institute of Materials Physics, Atomistilor 405A, 077125 Magurele, Romania

Nr

LA NIVEL INTERNAȚIONAL				LA NIVEL NAȚIONAL				TOTAL ORE		NR.MEDIU ORE/ UTILIZATOR	
OP.EC.		UCD		OP.EC.		UCD					
R	P	R	P	R	P	R	P	R	P	R	P
1	2	33	35	2	3	48	50	21000	22500	250	250

unde:

- R = valoare realizată în anul 2021
- P = valoare planificată în anul 2022

din punctul de vedere al utilizatorilor, alții decât personalul instalației/ obiectivului de interes național, astfel:

- operatori economici la nivel internațional
- operatori economici la nivel național
- unități de cercetare-dezvoltare la nivel internațional
- unități de cercetare-dezvoltare la nivel național

2.11 GRADUL DE UTILIZARE

GRAD DE UTILIZARE	R anul 2021 [%]	P anul 2022 [%]	OBSERVAȚII
TOTAL, din care:	80	85,6	S-a raportat la funcționare 24/24, 365 zile pe an, 3 instalații
COMANDĂ INTERNĂ	5	6,6	
COMANDĂ UCD	70	71	
COMANDĂ OP.EC.	5	8	

2.12 REZULTATE DIN EXPLOATARE

2.12.1 VENITURI DIN EXPLOATARE

Lei

a. Realizate în anul 2021	22.504
b. Planificate a se realiza în anul 2022	50.000

2.12.2 CHELTUIELI DE DEZVOLTARE DIN SURSE ATRASE

Lei

a. Realizate în anul 2021	3.664.719
b. Planificate a se realiza în anul 2022	4.000.000

2.12.3 PARTENERIATE/ COLABORĂRI INTERNAȚIONALE/ NAȚIONALE

Nr

a. Realizate în anul 2021	84
b. Planificate a se realiza în anul 2022	90

2.12.4 ARTICOLE

Nr

a. Realizate în anul 2021	37
b. Planificate a se realiza în anul 2022	45

1. A. Chikina, D. V. Christenssen, V. Borisov, M. A. Husanu, Y. Z. Chen, X. Q. Wang, T. Schmitt, M. Radovic, N. Nagaosa, A. S. Mishchenko, R. Valenti, N. Pryds, V. N. Strocov, Band-Order Anomaly at the gamma-Al₂O₃/SrTiO₃ Interface Drives the Electron-Mobility Boost, *ACS Nano* 15, 4347-4356 (2021).
IF = 15.881, AIS = 3.681.
2. C. Chirila, G. A. Boni, L. D. Filip, M. A. Husanu, S. Neatu, C. M. Istrate, G. Le Rhun, B. Vilquin, L. Trupina, I. Pasuk, M. Botea, I. Pintilie, L. Pintilie, Effect of strain and stoichiometry on the ferroelectric and pyroelectric properties of the epitaxial Pb(Zr_{0.2}Ti_{0.8})O₃ films deposited on Si wafers, *Mater. Sci. Eng. B* 266, 115042 (2021).
IF = 4.051, AIS = 0.646.
3. R. Bucureșteanu, L. M. Dițu, M. Ioniță, I. Călinescu, V. Rădițou, B. Cojocaru, L. O. Cinteza, C. Curuțiu, A. M. Holban, M. Enăchescu, L. B. Enache, G. Mustața, V. Chihaia, A. Nicolaev, E. L. Borcan and G. Mihăescu, Preliminary Study on Light-Activated Antimicrobial Agents as Photocatalytic Method for Protection of Surfaces with Increased Risk of Infections, *Materials* 14, 5307 (2021).
IF = 3.623, AIS = 0.597.
4. N. G. Apostol, I. C. Bucur, G. A. Lungu, C. A. Tache, C. M. Teodorescu, CO adsorption and oxidation at room temperature on graphene synthesized on atomically clean Pt(001), *Catal. Today* 366, 155–163 (2021).
IF = 6.766, AIS = 1.013.
5. N. G. Apostol, M. A. Hușanu, D. Lizzit, I. A. Hristea, C. F. Chirilă, L. Trupină, C. M. Teodorescu, CO adsorption, reduction and oxidation on Pb(Zr,Ti)O₃(001) surfaces associated with negatively charged gold nanoparticles, *Catal. Today* 366, 141–154 (2021).
IF = 6.766, AIS = 1.013.
6. C. M. Teodorescu, Ferroelectricity in thin films driven by charges accumulated at interfaces, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 23, 4085–4093 (2021).
IF = 3.676, AIS = 0.823.
7. C. M. Teodorescu, Spin asymmetry originating from densities of states: Criterion for ferromagnetism, structures and magnetic properties of 3d metals from crystal field based DOSs, *Res. Phys.* 25, 104241 (1–10) (2021).
IF = 4.476, AIS = 0.641.
8. I. Podolean, S. M. Coman, C. Bucur, C. Teodorescu, S. Kikionis, E. Ioannou, V. Roussis, A. Primo, H. Garcia, V. I. Parvulescu, Catalytic transformation of the marine polysaccharide ulvan into rare sugars, tartaric and succinic acids, *Catal. Today* 383, 345–357 (2022).
IF = 6.766, AIS = 1.013.
9. D. Macovei, F. Tolea, Long- and short-range order in the Ni₅₂Co₂Fe₂₀Ga₂₆ ferromagnetic Heusler alloy, *J. Appl. Crystal.* 54, 1207–1216 (2021).
IF = 3.304, AIS = 1.321.
10. A. Uthman, K. McCarthy, I.-A. Baragau, N. P. Power, D. J. Morgan, S. Dunn, S. Killian, T. Kennedy, S. Kellici, In-Situ Continuous Hydrothermal Synthesis of TiO₂ Nanoparticles on Conductive

- N-Doped MXene Nanosheets for Binder-Free Li-Ion Battery Anodes. *Chem. Eng. J.*, 430, 132976 (2021).
 IF = 13.273, AIS = 1.663.
11. T. Tite, A. C. Popa, B. W. Stuart, H. R. Fernandes, I. M. Chirica, G. A. Lungu, D. Macovei, C. Bartha, L. Albulescu, C. Tanase, S. Nita, N. Rusu, D. M. Grant, J. M. F. Ferreira, G. E. Stan, Independent and complementary bio-functional effects of CuO and Ga₂O₃ incorporated as therapeutic agents in silica- and phosphate-based bioactive glasses, *J. Materiomics*, 2021 (accepted), DOI 10.1016/j.jmat.2021.12.009.
 IF = 6.425, AIS = 1.566.
12. A.-T. Buruiana, F. Sava, N. Iacob, E. Matei, A. E. Bocirnea, M. Onea, A.-C. Galca, C. Mihai, A. Velea, V. Kuncser, Micrometer sized hexagonal Chromium Selenide flakes for cryogenic temperature sensors *Sensors* 21, 8084 (2021).
 IF = 3.576, AIS = 0.585.
13. M. Sima, E. Vasile, N. Preda, A. Sima, E. Matei, C. Logofatu, Effect of ferroelectric poling on the photoelectrochemical activity of hematite-BaTiO₃ nanowire arrays, *Int. J. Hydrogen Energy* 46, 36232–36244 (2021).
 IF = 5.816, AIS = 0.684.
14. P. G. Lebiere, A. P. del Pino, C. Logofatu, E. Gyorgy, Laser synthesis of Ni_xZn_yO/reduced graphene oxide/carbon nanotube electrodes for energy storage applications, *Appl. Surf. Sci.* 563, 150234 (2021).
 IF = 6.707, AIS = 0.873.
15. M. Sima, E. Matei, E. Vasile, A. Sima, N. Preda, C. Logofatu, Water oxidation at photoanodes based on hematite films and nanowire arrays, *Thin Solid Films* 724, 138626 (2021).
 IF = 2.183, AIS = 0.350.
16. Y. Esqueda-Barron, A. P. Perez del Pino, P. G. Garcia Lebiere, A. Musheghyan-Avetisyan, E. Bertran-Serra, E. Gyorgy, C. Logofatu, Boost of Charge Storage Performance of Graphene Nanowall Electrodes by Laser-Induced Crystallization of Metal Oxide Nanostructures, *ACS Appl. Mater. Interf.* 13, 17957–17970 (2021).
 IF = 9.229, AIS = 1.697.
17. N. C. Zoita, M. Dinu, A. E. Kiss, C. Logofatu, M. Braic, A comparative investigation of hetero-epitaxial TiC thin films deposited by magnetron sputtering using either hybrid DCMS/HiPIMS or reactive DCMS process, *Appl. Surf. Sci.* 537, 147903 (2021).
 IF = 6.707, AIS = 0.873.
18. P. G. Garcia Lebiere, A. P. Perez del Pino, G. D. Domenech Domingo, C. Logofatu, I. Martinez-Rovira, I. Yousef, E. Gyorgy, Laser fabrication of hybrid electrodes composed of nanocarbons mixed with cerium and manganese oxides for supercapacitive energy storage, *J. Mater. Chem. A* 9, 1192–1206 (2021).
 IF = 12.732, AIS = 2.171.
19. M. Secu, A. Kuncser, C. Negrila, A. M. Rostas, EPR spectroscopy and structural investigations, of Eu²⁺-doped chloroborate glass-ceramic, *Ceram. Internat.* 47, 35089–35095 (2021).
 IF = 4.527, AIS = 0.545.
20. L. Amarande, M. C. Cioangher, V. Toma, C. F. Miclea, M. Stefan, I. Pasuk, A. R. Iuga, C. Negrila, E. Matei, A. C. Palici Joita, Hard/soft effects of multivalence co-dopants in correlation with their location in PZT ceramics, *Ceram. Internat.* 47, 33382–33389 (2021).
 IF = 4.527, AIS = 0.545.
21. S. L. Iconaru, C. S. Ciobanu, D. Predoi, M. Motelica-Heino, C. C. Negrila, M. L. Badea, M. V. Predoi, C. M. Chifiriuc, M. Popa, Nitrogen and Bromide Co-Doped Hydroxyapatite Thin Films with Antimicrobial Properties, *Coatings* 11, 1505 (2021).
 IF = 2.881, AIS = 0.405.
22. C. Anastasescu, I. C. Gifu, C. Negrila, R. Socoteanu, I. Atkinson, J. M. Calderon-Moreno, C. Munteanu, G. Plavan, S. A. Strungaru, B. Cheatham, A. V. Malaroiu, V. S. Teodorescu, M. Anastasescu, M. Zaharescu, I. Balint, V. Lazarescu, Morpho-structural properties of ZnSe, TiO₂-ZnSe materials and enzymatic activity of their bioinorganic hybrids with lysozyme, *Mater. Sci. Eng. B* 272, 115350 (2021).
 IF = 4.051, AIS = 0.646.
23. D. Ion-Ebrasu, R. D. Andrei, S. Enache, S. Caprarescu, C. C. Negrila, C. Jianu, A. Enache, I. Boerasu, E. Carcadea, M. Varlam, B. S. Vasile, J. W. Ren, Nitrogen Functionalization of CVD Grown

- Three-Dimensional Graphene Foam for Hydrogen Evolution Reactions in Alkaline Media, *Materials* 14, 4952 (2021).
IF = 3.623, AIS = 0.595.
24. A. Gaddam, A. R. Allu, S. Ganisetti, H. R. Fernandes, G. E. Stan, C. C. Negrila, A. P. Jamale, F. Mear, L. Montagne, J. M. F. Ferreira, Effect of Vanadium Oxide on the Structure and Li-Ion Conductivity of Lithium Silicate Glasses, *J. Phys. Chem. C* 125, 16843–16857 (2021).
IF = 4.126, AIS = 0.969.
25. M. Oprica, M. Iota, M. Daescu, S. N. Fejer, C. Negrila, M. Baibarac, Spectroscopic studies on photodegradation of atorvastatin calcium, *Sci. Rep.* 11, 15338 (2021).
IF = 4.380, AIS = 1.285.
26. V. Mihalache, C. Negrila, I. Mercioniu, N. Iacob, V. Kuncser, Zn-Fe-oxide nanostructures of different iron concentrations for multifunctional applications: properties and precursor influence, *Phys. Chem. Chem. Phys.* 23, 16107–16127 (2021).
IF = 3.676, AIS = 0.823.
27. O. El Khouja, A. C. Galca, K. Nouneh, M. Y. Zaki, M. E. Touhami, M. Taibi, E. Matei, C. C. Negrila, M. Enculescu, L. Pintilie, Structural, morphological and optical properties of Cu-Fe-Sn-S thin films prepared by electrodeposition at fixed applied potential, *Thin Solid Films* 721, 138547 (2021).
IF = 2.183, AIS = 0.350.
28. A. Gaddam, A. R. Allu, H. R. Fernandes, G. E. Stan, C. C. Negrila, A. P. Jamale, F. O. Mear, L. Montagne, J. M. F. Ferreira, Role of vanadium oxide on the lithium silicate glass structure and properties, *J. Amer. Ceram. Soc.* 104, 2495–2505 (2021).
IF = 3.784, AIS = 0.676.
29. M. Baibarac, L. Stingescu, M. Stroe, C. Negrila, E. Matei, L. C. Cotet, I. Anghel, I. E. Sofran, L. Baia, Poly(Vinyl Chloride) Spheres Coated with Graphene Oxide Sheets: From Synthesis to Optical Properties and Their Applications as Flame-Retardant Agents, *Polymers* 13, 565 (2021).
IF = 4.329, AIS = 0.597.
30. C. C. Negrila, D. Predoi, R. V. Ghita, S. L. Iconaru, S. C. Ciobanu, M. Manea, M. L. Badea, A. Costescu, R. Trusca, G. Predoi, G. A. Stanciu, R. Hristu, L. D. Dragu, C. Bleotu, A. Groza, I. C. Marinas, M. C. Chifiriuc, Multi-Level Evaluation of UV Action upon Vitamin D Enhanced, Silver Doped Hydroxyapatite Thin Films Deposited on Titanium Substrate, *Coatings* 11, 120 (2021).
IF = 2.881, AIS = 0.405.
31. B. Cojocaru, C. Colbea, D. Avram, C. Istrate, L. E. Abramiuc, C. Tiseanu, Role of Ln type in the physical mechanisms of defect mediated luminescence of Li, Ln–SnO₂ nanoparticles, *J. Mater. Chem. C* 9, 148–157 (2021).
IF = 7.393, AIS = 1.253.
32. D. Bartos, C. Burducea, I. Burducea, G. Caragheorghopol, F. Constantin, L. Craciun, D. Dorobantu, M. Ghena, D. Iancu, A. Marcu, G. Mateescu, P. Mereuta, V. Moise, C. Negrila, D. Negut, M. Petris, M. Petrovici, L. Radulescu, V. Aprodu, L. Prodan, A. radu, G. Stoian, Ageing studies of Multi-Strip Multi-Gap Resistive Plate Counters based on low resistivity glass electrodes in high irradiation dose, *Nuclear Inst. Meth. Phys. Res. A* 1024, 166122 (2022).
IF=1.455, AIS=0.399.
33. A. Pena, Electron trapping in twisted light driven graphene quantum dots, *Phys. Rev. B* 105, 045405 (2022).
IF = 4.036, AIS = 0.976.
34. N. Nedelcu, V. Chiroiu, L. Munteanu, I. Girip, C. Rugina, A. Lőrinczi, E. Matei, A. Sobetkii, Design of highly transparent conductive optical coatings optimized for oblique angle light incidence, *Appl. Phys. A* 127, 575 (2021).
IF = 2.584, AIS = 0.333.
35. A. G. Tomulescu, L. N. Leonat, F. Neatu, V. Stancu, V. Toma, S. Derbali, S. Neatu, A. M. Rostas, C. Besleaga, R. Patru, I. Pintilie, M. Florea, Enhancing stability of hybrid perovskite solar cells by imidazolium incorporation, *Solar Energy Mater. Solar Cells* 227, 111096 (2021).
IF = 7.267, AIS = 1.128.
36. M. R. Buga, A. A. Spinu-Zaulet, C. G. Ungureanu, R. A. Mitran, E. Vasile, M. Florea, F. Neatu, Carbon-Coated SiO₂ Composites as Promising Anode Material for Li-Ion Batteries, *Molecules* 26, 4531 (2021).
IF = 4.412, AIS = 0.694.

37. S. Derbali, K. Nouneh, M. Florea, L. N. Leonat, V. Stancu, A. G. Tomulescu, A. C. Galca, M. Secu, L. Pintilie, M. Ebn Touhami, Potassium-containing triple-cation mixed-halide perovskite materials: Toward efficient and stable solar cells, *J. Alloys Compds.* 858, 158335 (2021).
IF = 5.316, AIS = 0.716.

2.12.5 BREVETE/ CERERI DE BREVET SOLICITATE

	Nr
a. Realizate în anul 2021	5
b. Planificate a se realiza în anul 2022	6

Acordate:

1. C. Cotirlan-Simioniuc, S. A. Manea, C. Logofatu, Structură de superlentilă electrooptică pentru imagistica cu rezoluție sub limita de difracție, brevet nr. 131292, data eliberării 26.02.2021.

Publicate:

2. C. M. Teodorescu, Sistem de selecție nanoparticule în funcție de dimensiuni și sarcină, separat, folosind un filtru electric și magnetic funcționând în vid împreună cu o secțiune de frânare într-o zonă cu gaz rarefiat, funcționând în regim continuu, CBI OSIM a2019 00706/04.11.2019. B.O.P.I. Nr. 5/2021, p. H01J (nr. 135010)
3. C. M. Teodorescu, Sistem de analiză de timp de zbor în gaz rarefiat, cu determinarea separată a dimensiunilor și sarcinii nanoparticulelor și aerosolilor, CBI OSIM a2019 00705/04.11.2019. B.O.P.I. Nr. 5/2021, p. H01J (nr. 135011)

Depuse:

4. A.-T. Buruiana, F. Sava, N. Iacob, E. Matei, A. E. Bocirnea, M. Onea, A.-C. Galca, C. Mihai, A. Velea, V. Kuncser, Senzor criogenic bazat pe plachete micrometrice hexagonale de seleniură de crom și metodă de obținere a acestuia A/00729/03.12.2021
5. C. Cotirlan-Simioniuc, Metasuprafețe integrate într-o structura activa compacta pentru controlul polarizării și mării imaginilor fara aberații optice, utilizand cristale piezoelectrice, cerere de brevet nr. a 2021 00156

2.13 OBIECTIVE STRATEGICE DE DEZVOLTARE ALE INSTALAȚIEI/ OBIECTIVULUI DE INTERES NAȚIONAL

(1) Ranforsarea colaborărilor cu facilitățile de radiație de sincrotron

Menținerea instalației CoSMoS la Elettra va putea satisface numai 7,5-10 % din cererea de a se efectua asemenea experimente; pe termen mediu, autoritățile din România ar trebui să sprijine finanțarea unei linii de fascicul 100 % românești, care ar putea satisface spre 100 % din cererea estimată (cca. 300 zile de fascicul).

Nu în ultimul rând, faptul că se vor putea efectua experimente în timp real deschide noi oportunități de colaborare cu industria chimică, petrochimică, farmaceutică, industria auto, electrotehnică și electronică. Echipele din INCDFM și, mai general, acelea din România care vor exploata această nouă facilitate vor putea efectua o tranziție importantă în caracterizare, de la rezultate statice (spectre, fotografii) la rezultate dinamice (filme ale diverselor evoluții). În știința materialelor, numărul echipelor capabile să furnizeze acest tip de rezultate este de numai câteva procente. Atractivitatea echipelor românești care vor utiliza radiația de sincrotron folosind, într-o primă fază, instalația CoSMoS, iar mai apoi și altele, va crește semnificativ.

Pe termen mediu, faptul că echipe românești vor începe să fie din ce în ce mai vizibile în mediile academic și industrial datorită calității rezultatelor obținute va conduce la posibilitatea atragerii de noi fonduri pentru dezvoltarea de linii de fascicul la sincrotronele

europene inaugurate mai recent (Elettra 2.0 Trieste - modernizare în 2 ani, Solaris Cracovia, ALBA Barcelona, Max IV Lund) sau fonduri private pentru finanțarea de cercetări aplicative.

(2) Spectroscopie de fotoelectroni în condiții apropiate de presiunea atmosferică

Sunt binecunoscute beneficiile analizelor materialelor și în special a suprafețelor acestora prin spectroscopie de fotoelectroni, aceasta fiind o tehnică permițând caracterizarea compozițională și chimică, cu sensibilitate de suprafață, precum și obținerea structurilor de bandă experimentale și a barierelor energetice la suprafețe și interfețe. Din cauza parcursului liber mediu redus al fotoelectronilor și a condițiilor de vid necesare folosirii surselor de raze X, această tehnică necesită condiții de vid ultraînalt, de regulă mai bun decât 10⁻⁸ mbar.

În același timp, în cercetările fizico-chimice din ultimii ani apare din ce în ce mai des necesitatea studierii în detaliu a reacțiilor chimice care apar la suprafețe și interfețe, domeniu în strictă conexiune cu domeniul catalizei eterogene. Apare ca un deziderat posibilitatea de analiză in situ la presiuni apropiate de presiunea atmosferică a speciilor moleculare adsorbite pe suprafețe, inclusiv a dinamicii lor reactive. Nemaivordind de o gamă largă de materiale care degazează puternic și care-și pierd proprietățile odată introduse în vid ultra-înalt. Acest tip de cercetări au devenit accesibile în ultimul deceniu prin punerea la punct a unor spectrometre unde se poate efectua analiza spectroscopiei de fotoelectroni la presiuni extrem de ridicate în vecinătatea probei (10 - 100 mbar, comparat cu maxim 10⁻⁸ mbar). Aceasta este posibil prin folosirea de raze X extrem de focalizate, astfel încât apertura de intrare a electronilor în analizorul de fotoelectroni poate fi foarte mică și de asemenea plasată foarte aproape de probă. Astfel, fotoelectronii vor parcurge un drum sub-milimetric prin gazul de presiune ridicată și o proporție convenabilă a lor nu vor fi împrăștiați de gaz, ci vor fi detectați de analizor.

La nivel național, o asemenea instalație nu mai există. În toată Europa de Est, s-a mai achiziționat o singură astfel de instalație la Charles University Prague. Instalația pe care ne propunem s-o achiziționăm este, însă, de o nouă generație, în special în ceea ce privește microfocalizarea razelor X ceea ce permite analiza unor arii mai restrânse (până la 200 μm diametru) și, în consecință, prin reducerea aperturii de intrare în sistemul de vid diferențial și a parcursului electronilor în zona de presiune ridicată, analiza la presiuni de până la 100 mbar. Astfel de instalații se produc de cca. 2 ani și sunt intens comercializate în momentul de față în special în Asia, Europa Occidentală și Statele Unite ale Americii.

Instalația de spectroscopie de fotoelectroni la presiune apropiată de cea ambientă (NAP-XPS) folosește o sursă de raze X monocromatizată cu microfocus (200 μm), o celulă pentru probe cu apertură variabilă de până la 300 μm pentru colectarea electronilor și un analizor de electroni cu optica de intrare modificată și cu mai multe etaje de pompaj diferențial. Aceasta permite analiza următoarelor tipuri de probe inaccesibile în mod normal pentru spectroscopia XPS: (i) lichide; (ii) suprafețe umede sau în interacțiune cu specii gazoase; (iii) materiale biologice; (iv) alimente; (v) artefacte arheologice; (vi) medicamente; (vii) cosmetice; (viii) soluri, minerale; (ix) geluri, implanturi, biomateriale, lentile de contact etc.; (x) materiale textile; (xi) baterii, celule de combustie; (xii) catalizatori; (xiii) polimeri, materiale plastice; (xiv) probe de gheață cu molecule organice imersate, de interes pentru cercetările din astrofizică, astro-chimie și exo-biologie; (xv) acoperiri și straturi subțiri sensibile.

**DIRECTOR GENERAL/
RECTOR**

**CS I Dr. Ionuț Marius
Enculescu**

DIRECTOR ECONOMIC

Ec. Gabriela Ivănuș

RESPONSABIL IOSIN

**CS I Dr. abil. Cristian Mihail
Teodorescu**