

RAPORT DE ACTIVITATE PE ANUL 2022 AFERENT INSTALAȚIEI/ OBIECTIVULUI DE INTERES NAȚIONAL “Rețea Națională de Instalații Complexe de tip XPS / ESCA”

1. CARACTERISTICI GENERALE

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

Instalația de Interes Național “Rețea Națională de Instalații Complexe de tip XPS / ESCA”, aprobată prin H. G. nr. 786/2014 (poz. 28 din Anexa I) permite efectuarea de studii de spectroscopie de fotoelectroni cuplate cu alte metode de analiză a suprafețelor și interfețelor prin difracție de electroni lenți (LEED), microscopie de baleiaj cu efect tunel (STM) cu rezoluție atomică, plus prepararea suprafețelor și heterostructurilor prin epitaxie din fascicul molecular (MBE). Una dintre facilitățile componente permite și studii pe arii limitate (cca. 2 micrometri), precum și cuplarea cu o instalație care emulează reacțiile chimice din mediul industrial. Este singura instalație de o asemenea complexitate de studiu al suprafețelor și interfețelor și de spectroscopie de fotoelectroni din tot Sud-Estul european, mai precis nicio altă facilitate similară nu este accesibilă în Grecia, Bulgaria, Ungaria, Cehia, Slovacia, Serbia, Croația, Slovenia, Bosnia-Herțegovina, Albania (etc.).

Spectroscopia de fotoelectroni de tip XPS/ESCA este singura metodă cunoscută care dă o imagine completă a compoziției chimice a materialelor complexe cu sensibilitate de suprafață, iar alte derivate ale acestei tehnici permit determinarea structurii cristaline și structurii electronice, precum și a proprietăților feroelectrice (prin analiza curburilor de bandă) sau magnetice (prin spectroscopie de fotoelectroni cu rezoluție de spin) ale materialelor. La aceasta se adaugă tehnicile complementare care permit analiza morfologiei cu rezoluție atomică, precum și sinteza materialelor și heterostructurilor cu prezizii de ordinul fracțiunilor de nanometru. De asemenea, una din componentele acestei instalații este cuplată la o linie de fascicul de radiație de sincrotron la Elettra, Trieste, rezultând într-una dintre cele mai performante instalații de științe ale suprafeței și de spectroscopie de fotoelectroni ultrarapidă și de înaltă rezoluție din lume. În total, instalația permite studii foarte complexe de fizica corpului solid și de știința materialelor, dar metodele aferente sunt foarte utilizate în chimie, cataliză, sau metalurgie și din ce în ce mai des utilizate în mecanică (tribologie), științe biologice, microelectronică și biologie. O cercetare pe Web of Science după spectroscopii de fotoelectroni (+ XPS + ESCA) rezultă în cca. 250 000 rezultate, după LEED + RHEED dau cca. 16 000 rezultate, după STM + STS rezultă cca. 67 000 rezultate, după LEEM + PEEM cca. 4000 de rezultate.

În total, Instalația de Interes Național “Rețea Națională de Instalații Complexe de tip XPS / ESCA” are o valoare de cca. 19 milioane lei și a fost achiziționată și completată prin mai multe proiecte de tip Capacități, Nucleu sau din fonduri structurale, după o donație inițială de la Universitatea Catolică de la Louvain-la-Neuve, care a permis cristalizarea domeniului în România la începutul anilor 2000. Facilitatea este deservită actualmente de o echipă de cca. 20 de cercetători, ingineri și tehnicieni și are anual peste 30 de echipe beneficiare la nivel internațional și peste 40 de echipe beneficiare la nivel național, producând anual cca. 40-50 de articole indexate pe Web of Science, multe în reviste cu factor de impact extrem de ridicat.

Componentele principale sunt următoarele:

- a) Un cluster complex de studii de știința suprafețelor și interfețelor. 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. Producător: Specs, Berlin, Germania.
- b) Un alt cluster complex de știința suprafețelor și interfețelor („sistemul multimetodă” cuplat cu MBE), localizat în continuare în INCDFM. Producător: Specs, Berlin, Germania.
- c) O instalație de spectroscopie de fotoelectroni cu posibilități de analiză pe arie microscopică, posibilități de introducere a mai multor probe și de analiză automatizată a acestora și dotată cu celulă de tratare a probelor în condiții de presiune și temperatură ridicată (4 bar / 1000 °C). Producător: Kratos, Manchester, Marea Britanie.

d) O instalație de microscopie de electroni lenți și de fotoelectroni (LEEM=PEEM) cu rezoluție spațială de până la 4 nm în modul LEEM și 30 nm în modul PEEM. Producător: Specs, Berlin, Germania.

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 din 1996
d. Modificări ulterioare	H. G. nr. 1400/2005, H. G. nr. 1006/2015
e. Director general/ Rector	CS1 Dr. Ionuț Marius Enculescu
f. Adresă UCD	Str. Atomistilor 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. Atomistilor nr. 405A, 077125 Măgurele jud. Ilfov
c. Telefon	0724-291045
d. Fax	021-3690177
e. E-mail	teodorescu@infim.ro
j. Pagina web a IOSIN	https://infim.ro/instalatie-de-interes-national/

2.3 VALOAREA INSTALAȚIEI/ OBIECTIVULUI DE INTERES NAȚIONAL

		Lei
TOTAL		18.215.623
din care:	Terenuri și amenajări spații	0
	Clădiri	0
	Echipamente și software	18.215.623
	Altele (menționați care)	0

2.4 SUPRAFAȚA INSTALAȚIEI/ OBIECTIVULUI DE INTERES NAȚIONAL

		MP
TOTAL TERENURI		
din care:	Teren	0
	Amenajare spații verzi	0

	Drumuri de acces betonate și asfaltate	0
	Platforme betonate și asfaltate	0
TOTAL CLĂDIRI		344,78
din care:	Birouri	82,08
	Spații tehnologice (hale, anexe - se va menționa)	0
	Vestiare, grupuri sanitare, holuri	0
	Laboratoare, ateliere	262,70
	Săli conferințe	0

2.5 DEVIZ POST-CALCUL PENTRU ANUL 2022 (de la bugetul de stat, conform deconturilor transmise și aprobate)

Lei

Nr.crt.	explicații (capitol/categorie de cheltuieli)	TOTAL
1	Cheltuieli cu personalul, din care:	440.700,00
1.1	Salarii directe	431.003,00
1.2	Contribuția asiguratorie de muncă (CAM)	9.697,00
2	Cheltuieli cu materiile prime și materialele, din care:	73.803,41
2.1	Cheltuieli cu materiile prime	
2.2	Cheltuieli cu materialele consumabile, inclusiv materialele auxiliare, combustibili utilizați direct pentru IOSIN, piese de schimb	73.803,41
2.3	Cheltuieli privind obiectele de inventar	0,00
2.4	Cheltuieli privind materialele nestocate	0,00
2.5	Cheltuieli cu energia, apa și gazele utilizate direct pentru IOSIN	0,00
3	Cheltuieli cu serviciile prestate de terți, din care:	358.624,64
3.1	Cheltuieli cu întreținerea și reparațiile, inclusiv amenajarea spațiilor	0,00
3.2	Cheltuieli cu redevențe, locații de gestiune și chirii	0,00
3.3	Cheltuieli cu transportul de bunuri	924,44
3.4	Cheltuieli cu servicii pentru teste, analize, măsurători etc	0,00
3.5	Cheltuieli cu servicii informatice	0,00
3.6	Cheltuieli cu servicii de expertiză, evaluare, asistență tehnică etc	0,00
3.7	Cheltuieli cu servicii de întreținere a echipamentelor	43.626,15
3.8	Cheltuieli cu alte servicii strict necesare pentru IOSIN	314.074,05
	Sub-total I (1+2)	514.503,41
	Sub-total II (1+2+3)	873.128,05

Nr.crt.	explicații (capitol/categorie de cheltuieli)	TOTAL
4	Cheltuieli cu regia (%** aplicabil la Sub-total I)	102.340,95
	TOTAL CHELTUIELI (1+2+3+4)	975.469,00

2.6 DEVIZ ANTECALCUL ESTIMATIV PENTRU ANUL 2023 (estimat a se solicita de la bugetul de stat)

Lei

Nr.crt.	explicații (capitol/categorie de cheltuieli)	TOTAL
1	Cheltuieli cu personalul, din care:	1.781.940
1.1	Salarii directe	1.742.729
1.2	Contribuția asiguratorie de muncă (CAM)	39.211
2	Cheltuieli cu materiile prime și materialele, din care:	1.597.800
2.1	Cheltuieli cu materiile prime	631.200
2.2	Cheltuieli cu materialele consumabile, inclusiv materialele auxiliare, combustibili utilizați direct pentru IOSIN, piese de schimb	966.600
2.3	Cheltuieli privind obiectele de inventar	0
2.4	Cheltuieli privind materialele nestocate	0
2.5	Cheltuieli cu energia, apa și gazele utilizate direct pentru IOSIN	
3	Cheltuieli cu serviciile prestate de terți, din care:	375.000
3.1	Cheltuieli cu întreținerea și reparațiile, inclusiv amenajarea spațiilor	100.000
3.2	Cheltuieli cu redevențe, locații de gestiune și chirii	0
3.3	Cheltuieli cu transportul de bunuri	0
3.4	Cheltuieli cu servicii pentru teste, analize, măsurători etc	200.000
3.5	Cheltuieli cu servicii informatice	0
3.6	Cheltuieli cu servicii de expertiză, evaluare, asistență tehnică etc	50.000
3.7	Cheltuieli cu servicii de întreținere a echipamentelor	25.000
3.8	Cheltuieli cu alte servicii strict necesare pentru IOSIN	0
	Sub-total I (1+2)	3.379.740
	Sub-total II (1+2+3)	3.754.740
4	Cheltuieli cu regia (%** aplicabil la Sub-total I)	675.948
	TOTAL CHELTUIELI (1+2+3+4)	4.430.688

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. Spectroscopia de fotoelectroni excitați folosindu-se radiație X (X-ray photoelectron spectroscopy, XPS, sau Electronic structure for chemical analysis, ESCA) au fost încununuate 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), 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.

(b) Parcursul liber mediu al fotoelectronilor prin material este de ordinul nanometrilor, deci metoda caracterizează materialul aproape în exclusivitate în vecinătatea suprafeței acestuia. 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). 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. S-a realizat că foarte multe procese de importanță tehnologică: fricțiunea, coroziunea, cataliza, fotocataliza, procesele fotovoltaice, 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.

(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 photoelectron spectroscopy, ARPES). Se poate detecta și distribuția fotoelectronilor cu rezoluție de spin, având acces la structura de bandă a solidelor magnetice.

(d) Analizându-se distribuția unghiulară a fotoelectronilor, se pot deduce geometriile suprafețelor sau modul de inserare a impurităților într-un solid monocristalin, prin difracție de fotoelectroni.

(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. Echipa din INCDFM 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 Photoemission electron Microscopy (PEEM).

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 anul 2000, Universitatea Catolică Louvain-la-Neuve a donat INCDFM o instalație produsă de Vacuum Generators (VG-ESCA Mk II), care a fost declarată Instalație de

Interes Național începând cu 2003. Această instalație realiza măsurători de spectroscopie de fotoelectroni (X-ray photoelectron spectroscopy XPS / electronic structure for chemical analysis ESCA), cu posibilitatea de curățare a probelor prin bombardament ionic și tratamente termice *in situ*, vidul limită fiind în domeniul 10^{-9} mbar.

Domeniul științei suprafețelor și interfețelor s-a întărit constant în România începând cu anul 2007, când instalația menționată mai sus a fost actualizată printr-un proiect de tip CEEEX - Modul 4. 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 prin LEED, RHEED și AES. Prima instalație „multimetodă” a fost și ea suplimentată cu o incintă MBE similară în 2010–2011. De asemenea, în 2010 s-a achiziționat în INCDFM și o instalație de microscopie de fotoelectroni (PEEM) care realizează și microscopie de electroni lenți (low energy electron microscopy, LEEM). Ambele clustere descrise mai sus și instalația LEEM–PEEM au fost integrate 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 cu posibilități de spectro-microscopie (analiză XPS pe arii restrânse, mergând până la $2 \mu\text{m}$) și posibilitatea de tratament a probelor la presiuni și temperaturi ridicate (4 bar/1000 °C). În momentul de față INCDFM exploatează 3 din cele 10 instalații XPS/ESCA existente în România, cele din institut 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, angle resolved photoelectron spectroscopy ARPES, ceea ce permite înregistrarea structurii electronice, inclusiv cu rezoluție de spin, thermally programmed desorption TPD, profilare chimică în adâncime, difracție de fotoelectroni sau de electroni Auger etc.). INCDFM este singura instituție din țară care în jurul științei suprafețelor și interfețelor/spectroscopiilor de fotoelectroni deține un laborator separat, cu 23 salariați.

Radiația de sincrotron s-a dovedit în ultimele decenii 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). Un sincrotron de generația a 3-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 %. Printre cele mai vechi și mai performante sincrotrone de generația a 3-a din lume este centrul Elettra din Trieste, Italia.

În momentul de față, în lume există 22 de centre mari de radiație de sincrotron, 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. 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 (Austria, Cehia și Slovenia), care au semnat acorduri de colaborare cu centrele existente (Elettra Trieste în toate cele trei cazuri, Cehia 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 de fascicul românească, cel mai probabil la Elettra.

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”, apoi în cadrul unui parteneriat “gruppo di ricerca” semnat între INCDFM și Elettra. Proiectul de termen lung și parteneriatul au ca scop studiul interfețelor între grafene și materiale feroelectrice, sisteme-model de transistor cu efect de câmp cu canal grafenic și poartă feroelectrică, măsurători dinamice ale materialelor feroelectrice, studii de molecule adsorbite și desorbite pe suprafețe feroelectrice, nanocatalizatori bidimensionali, evidența de sisteme magnetice bidimensionale (suprafața Pt(001)-hex, grafena, gazul electronic bidimensional în titanatul de stronțiu (001)), heterostructuri multiferice, 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 din industria automobilă sau la captarea gazelor cu efect de seră. Avantajele instalației CoSMoS la SuperESCA, 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, cu rezoluție atomică. Elettra asigură anual timp de fascicul de 10 zile pe an sub statutul de „in-house research”, plus 12 zile pe an de timp de fascicul acordat propunerilor venind exclusiv de la echipe din România. INCDFM plătește în schimbul acestor servicii 65.000 Euro pe an, dintre care 50.000 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).

2.8 STRUCTURA UTILIZATORILOR

Toate instituțiile de CDI, operatori economici din domeniul industrial care necesită analize, operatori economici cu activități CDI în cadrul proiectelor de colaborare, operatori economici care necesită expertize.

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
- Existența unui Regulament de acces avizat/neavizat de către MCID

Descrierea serviciilor specifice IOSIN: (i) analize calitative și cantitative prin spectroscopie de fotoelectroni; (ii) analizele anterioare, cuplate cu profilarea în adâncime a probelor; (iii) studii de modificări de suprafață induse de tratamente termice și/sau adsorbții de molecule pe suprafață; (iv) structură de bandă experimentală prin ARPES, cu sau fără rezoluție de spin (pentru probe monocristaline); (v) determinări structurale prin difracție de electroni (LEED, RHEED, pentru probe monocristaline); (vi) determinări morfologice prin microscopie de baleiaj cu efect tunel STM (pentru probe conductoare); (vii) sinteze și analize *in situ* de suprafețe atomice curate și straturi subțiri prin epitaxie din fascicul molecular; (viii) suport la interpretarea datelor și redactarea lucrărilor științifice; (ix) consultanță la realizarea de proiecte științifice.

Regulamentul propriu este afișat pe site (<https://infim.ro/instalatie-de-interes-national/>), este aprobat de autoritatea de stat pentru cercetare-dezvoltare (anexat) și conține modalitățile de acces pentru utilizatori din următoarele categorii: (1) Accesul pe bază de contracte economice, (2) Accesul pe bază de proiecte (parteneriate) în curs, (3) Accesul pe bază de proiecte științifice, fără implicații financiare, (4) Accesul la primele experiențe, (5) Experiențe proprii ale grupului. Tariful pentru operatori economici este de 100 Euro fără TVA pe oră.

2.10 LISTA UTILIZATORILOR și domeniile de activitate/ activități prestate

Orders and Collaborations				
	Institute/University	Laboratory/Faculty	Group/Department	Contact Scientist
Internal order				
1	National Institute of Materials Physics, Măgurele, Romania	Heterostructures	Complex Heterostructures and Perovskite Oxides	Aurelian Cătălin Gâlcă
2	National Institute of Materials Physics, Măgurele, Romania	Optical Processes in Nanostructured Materials	Optical Processes in Nanostructured Materials	Mihaela Baibarac
3	National Institute of Materials Physics, Măgurele, Romania	Optical Processes in Nanostructured Materials	Optical Processes in Nanostructured Materials	Alin Velea
4	National Institute of Materials Physics, Măgurele, Romania	Catalytic Materials and Catalysis	Catalytic Materials and Catalysis	Florentina Neațu
5	National Institute of Materials Physics, Măgurele, Romania	Heterostructures	Complex Heterostructures and Perovskite Oxides	Teddy Tite
6	National Institute of Materials Physics, Măgurele, Romania	Atomic structures and defects in advanced materials	Nanomaterials and nanostructures based on Si, Ge, and Sn	Magdalena Ciurea
7	National Institute of Materials Physics, Măgurele, Romania	Optical Processes in Nanostructured Materials	Optical Processes in Nanostructured Materials	Mihai Secu
8	National Institute of Materials Physics, Măgurele, Romania	Heterostructures	Complex Heterostructures and Perovskite Oxides	Lucian Trupină
9	National Institute of Materials Physics, Măgurele, Romania	Atomic structures and defects in advanced materials	Nanomaterials and nanostructures based on Si, Ge, and Sn	Ionel Stăvărache
10	National Institute of Materials Physics, Măgurele, Romania	Heterostructures	Complex Heterostructures and Multifunctional Materials	George Stan
11	National Institute of Materials Physics, Măgurele, Romania	Heterostructures	Multifunctional nanoparticles for biomedical applications	Daniela Predoi

12	National Institute of Materials Physics, Măgurele, Romania	Heterostructures	Complex Heterostructures and Perovskite Oxides	Georgia Boni
13	National Institute of Materials Physics, Măgurele, Romania	Heterostructures	Complex Heterostructures and Perovskite Oxides	Iuliana Pasuk
14	National Institute of Materials Physics, Măgurele, Romania	Heterostructures	Complex Heterostructures and Perovskite Oxides	Lucian Pintilie / Cristina Chirilă
15	National Institute of Materials Physics, Măgurele, Romania	Atomic structures and defects in advanced materials	Nanomaterials and nanostructures based on Si, Ge, and Sn	Adrian Slav
National				
16	Horia Hulubei National Institute of Nuclear Physics and Engineering, Măgurele, Romania	Hadronic Physics	NIHAM Centre of Excellence	Mihai Petrovici
17	Ilie Murgulescu National Institute of Physical Chemistry, Bucharest, Romania	Surface Chemistry and Catalysis	Surface Chemistry and Catalysis	Crina Anastasescu
18	Ilie Murgulescu National Institute of Physical Chemistry, Bucharest, Romania	Chemical Kinetics	Chemical Kinetics	Anca Vasile
19	Ilie Murgulescu National Institute of Physical Chemistry, Bucharest, Romania	Electrochemistry and Corosion	Electrochemistry and Corosion	Loredana Preda
20	Ilie Murgulescu National Institute of Physical Chemistry, Bucharest, Romania	Surface Chemistry and Catalysis	Surface Chemistry and Catalysis	Monica Pavel
21	University of Bucharest, Romania	Faculty of Chemistry	Chemical Technology and Catalysis	Ioan-Cezar Marcu
22	Institute of Materials Sciences of Barcelona, Spain	Nanostructured Materials	Nanostructured Materials	Angel Pérez del Pino
23	University of Bucharest, Romania	Faculty of Chemistry	Research Centre of Catalysts and Catalytic Processes	Vasile Pârvulescu

24	University of Bucharest, Romania	Faculty of Biology	Department of Microbiology	Răzvan Bucureşteanu
25	Alexandru Ioan Cuza University, Iaşi, Romania	Faculty of Chemistry	Department of Chemistry	Aurel Pui
26	National Institute of Isotopic and Molecular Technologies, Cluj-Napoca, Romania	Physics of Nanostructured Systems	Nanocomposite Materials with Tunable Properties	Ovidiu Pană (2 distinct orders)
27	Ilie Murgulescu National Institute of Physical Chemistry, Bucharest, Romania	Surface Chemistry and Catalysis	Surface Chemistry and Catalysis	Viorica Pârvulescu
28	Ilie Murgulescu National Institute of Physical Chemistry, Bucharest, Romania	Oxide Compounds and Materials Science	Oxide Compounds and Materials Science	Maria Zaharescu
29	Babes-Bolyai University, Cluj, Romania	Faculty of Physics	Biomolecular Physics	Simion Astilean
30	Ilie Murgulescu National Institute of Physical Chemistry, Bucharest, Romania	Oxide Compounds and Materials Science	Oxide Compounds and Materials Science	Irina Atkinson / Luminița Predoană
31	National Institute for Research and Development in Microtechnologies, Bucharest	Centre of Nanotechnologies CNT-IMT	Molecular Nanotechnology	Emil-Mihai Pavelescu
32	University of Bucharest, Romania	Faculty of Chemistry	Department of Organic Chemistry, Biochemistry, and Catalysis	Simona Coman
33	Alexandru Ioan Cuza University of Iaşi, Romania	Faculty of Chemistry	Department of Catalysis	Adrian Borhan
34	National Institute of Research and Development for Technical Physics Iaşi, Romania	Materials Analysis	HYDROGEN STORAGE MATERIALS	Daniel Gherca
35	Horia Hulubei National Institute of Nuclear Physics and Engineering, Măgurele, Romania	Hadronic Physics	NIHAM Centre of Excellence	Gheorghe Mateescu
36	National Institute for Laser, Plasma and Radiation Physics, Magurele, Romania	Center For Advanced Laser Technologies	Laser Material Processing Laboratory	Raluca Ivan
37	National Institute for Research and Development	Research Centre for Nanotechnologies	Laboratory for Carbon Based Nanotechnologies	Silviu Vulpe

	in Microtechnologies- IMT Bucharest	and Carbon-based Nanomaterials- CENASIC	and Nanostructures	
International				
38	Extreme Light Infrastructure Nuclear Physics	Lasers System Department	Optics Laboratory	Gabriel Bleotu
39	Solaris National Synchrotron Radiation Centre, Krakow, Poland	Phelix Beamline	Phelix Beamline	Magdalena Szczepanik-Ciba
40	Paul Scherrer Institute, Villigen, Switzerland	Swiss Light Source	Phoenix Beamline	Thomas Hutwelker / Camelia Borca
41	Paul Scherrer Institute, Villigen, Switzerland	Swiss Light Source	ADRESS Beamline	Thorsten Schmitt / Vladimir Strocv
42	Technical University of Denmark, Copenhagen, Denmark	Department of Energy Conversion and Storage	Functional Oxide Materials	Nini Pryds
43	Paul Scherrer Institute, Villigen, Switzerland	Swiss Light Source	Microscopy and Magnetism	Carlos Vaz / Federico Stramaglia
44	Institute of Applied Physics, Chişinău, Republic of Moldova	Thermo- and Hydrodynamic Processes	Thermo- and Hydrodynamic Processes	Tatiana Datsko
45	Elettra Synchrotrone, Trieste, Italy	SuperESCA beamline	SuperESCA beamline	Silvano Lizzit
46	Elettra Synchrotrone, Trieste, Italy	SpectroMicroscopy beamline	SpectroMicroscopy beamline	Alexey Barinov
47	University of Udine, Udine, Italy	Polytechnic Department of Engineering and Architecture	Polytechnic Department of Engineering and Architecture	Daniel Lizzit
48	London South Bank University, London, United Kingdom	School of Engineering	Chemical and Energy Engineering	Suela Kellici
49	Imperial College London, London, United Kingdom	Faculty of Engineering	Department of Chemical Engineering	Magda Titirici
50	London South Bank University, London, United Kingdom	School of Engineering	Chemical and Energy Engineering	Conor Davids
51	London South Bank University, London, United Kingdom	School of Engineering	Chemical and Energy Engineering	Kiem Giap Nguyen

52	London South Bank University, London, United Kingdom	School of Engineering	Chemical and Energy Engineering	Sunil Jayantha Hettiarachchi
53	London South Bank University, London, United Kingdom	School of Engineering	Chemical and Energy Engineering	Uthman Kayode Alli
54	Imperial College London, United Kingdom	Faculty of Engineering	Department of Chemical Engineering	Richard Lobo
55	University of Hohenheim	Institute for Agricultural Engineering	Conversion technologies of bio-based resources	Muhammad-Jamal Alhnidi
56	Paul Scherrer Institut	Swiss Light Source	Laboratory for Advanced Spectroscopy and X-ray Sources	Vladimir Strocov
57	Università dell'Aquila	Dipartimento di Scienze Fisiche e Chimiche	Dipartimento di Fisica	Federico Bisti
58	Moscow Institute of Physics and Technology	Laboratory for Nanoelectronics	Functional Materials and Devices	Leonid Lev
59	RIKEN	Center for Emergent Matter Science	Strong Correlation Theory Research Group	Andrey Mishchenko
60	Chinese Academy of Sciences	Institute of Physics	Nanoscale Physics and Devices Laboratory	Yunzhong Chen
61	Consiglio Nazionale delle Ricerche	SuPerconducting and other INnovative materials and devices institute	Novel superconducting and functional materials	Fabio Miletto Granzio
62	Technical University of Denmark	School of Physics	Department of Energy Conversion and Storage	Nini Pryds
63	Ruhr-Universität Bochum	School of Physics	Department of Theoretical Physics	Frank Lechermann
64	Universitat Politècnica de Valencia	Instituto Universitario de Tecnología Química	Energy and Sustainability	Hermenegildo García
65	University of Geneva	Faculty of Chemistry	Department of Organic Chemistry, Biochemistry and Catalysis	Stefano Gariglio

66	Institute of Materials Science of Barcelona	Magnetic Materials and Functional Oxides	Multifunctional Thin Films and Complex Structures	Josep Fontcuberta
----	---	--	---	-------------------

										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
0	0	29	30	0	1	37	40	7884	8400	119	120

unde:

- R = valoare realizată în anul 2022
- P = valoare planificată în anul 2023

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 2022 [%]	P anul 2023 [%]	OBSERVAȚII
TOTAL, din care:	90	92	Gradul de utilizare a echipamentelor / utilajelor: cca. 90 % din funcționarea 24/24, 7/7. Restul fiind întreruperi pentru diferite reparații sau intervenții.
COMANDĂ INTERNĂ	22,5	20	
COMANDĂ UCD	67,5	70	
COMANDĂ OP.EC.	0	2	

2.12 REZULTATE DIN EXPLOATARE

2.12.1 VENITURI DIN EXPLOATARE (altele decât finanțarea de la bugetul de stat)

Lei

a. Realizate în anul 2022	1.270.000
b. Planificate a se realiza în anul 2023	4.430.688

2.12.2 CHELTUIELI DE DEZVOLTARE DIN SURSE ATRASE (altele decât finanțarea de la bugetul de stat)

Lei

a. Realizate în anul 2022	1.534.594
b. Planificate a se realiza în anul 2023	1.800.000

2.12.3 PARTENERIATE/ COLABORĂRI INTERNAȚIONALE/ NAȚIONALE

Nr

a. Realizate în anul 2022	29/37
b. Planificate a se realiza în anul 2023	30/40

2.12.4 ARTICOLE

Nr

a. Realizate în anul 2022	43
b. Planificate a se realiza în anul 2023	45

Published / Accepted / Submitted Articles

1. S.A. Bouzid, A. Essoumhi, A.M. Rostas, A.C. Kuncser, C.C. Negrila, N. Iacob, A. Galatanu, B. Popescu, M. Sajieddine, A.C. Galca, V. Kuncser, *Enhanced magnetocaloric properties of $La_{0.8}K_{0.2-x}Pb_xMnO_3$ nanoparticles by optimizing Pb doping concentrations*, *Ceramics International* **48**(12), 16845-16860 (2022). JIF = 5.532, AIS = 0.552.
2. O. El Khouja, C.C. Negrila, K. Nouneh, M. Secu, M.E. Touhami, E. Matei, V. Stancu, M. Enculescu, V. Kuncser, A.C. Galca, *Bulk and surface characteristics of co-electrodeposited Cu_2FeSnS_4 thin films sulfurized at different annealing temperatures*, *Journal of Alloys and Compounds* **906**, 164379:1-164379:12 (2022). JIF = 6.371, AIS = 0.700.
3. B. Butoi, C.S. Ciobanu, S.L. Iconaru, C.C. Negrila, M.A. Badea, M. Balas, A. Dinischiotu, G. Predoi, B. Bitu, A. Groza, D. Predoi, *Iron-oxide-nanoparticles-doped polyaniline composite thin films*, *Polymers* **14**(9), 1821:1-1821:16 (2022). JIF = 4.967, AIS = 0.612.
4. N. Toulbe, I. Smaranda, C. Negrila, C. Bartha, C.M. Manta, M. Baibarac, *Photodegradation of azathioprine in the presence of sodium thiosulfate*, *International Journal of Molecular Sciences* **23**(7), 3975:1-3975:18 (2022). JIF = 6.208, AIS = 1.064.
5. A. Vasile, F. Papa, V. Bratan, C. Munteanu, M. Teodorescu, I. Atkinson, M. Anastasescu, D. Kawamoto, C. Negrila, C.D.D. Ene, T. Spataru, I. Balint, *Water denitration over titania-supported Pt and Cu by combined photocatalytic and catalytic processes: implications for hydrogen generation properties in a photocatalytic system*, *Journal of Environmental Chemical Engineering* **10**(2), 107129:1-107129:22 (2022). JIF = 7.968, AIS = 0.767.
6. 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 Instruments & Methods in Physics Research A* **1024**, 166122:1-166122:15 (2022). JIF = 1.335, AIS = 0.387.
7. P.G. Lebiere, E. Gyorgy, C. Logofatu, D. Naumenko, H. Amenitsch, P. Rajak, R. Ciancio, A.P. del Pino, *Unravelling the origin of the capacitance in nanostructured nitrogen-doped carbon - NiO hybrid electrodes deposited with laser*, *Ceramics International* **48**(11), 15877-15888, (2022). JIF = 5.532, AIS = 0.552.
8. H. Li, Y.L. Gan, M.A. Husanu, R.T. Dahm, D.V. Christensen, M. Radovic, J.R. Sun, M. Shi, B.G. Shen, N. Pryds, Y.Z. Chen, *Robust electronic structure of manganite-buffered oxide interfaces with extreme mobility enhancement*, *ACS Nano* **16**(4), 6437-6443 (2022). JIF = 18.027, AIS = 3.560.
9. R. Bucuresteanu, M. Ionita, V. Chihaiia, A. Ficai, R.D. Trusca, C.I. Ilie, A. Kuncser, A.M. Holban, G. Mihaescu, G. Petcu, A. Nicolaev, R.M. Costescu, M. Husch, V. Parvulescu, L.M. Ditu,

Antimicrobial properties of TiO₂ microparticles coated with Ca- and Cu-based composite layers, International Journal of Molecular Sciences **23**(13), 6888:1-6888:18 (2022). JIF = 6.208, AIS = 1.064.

10. 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*, Catalysis Today **383**, 345-357 (2022). JIF = 6.562, AIS = 0.914.

11. C.M. Teodorescu, *Self-consistently derived sample permittivity in stabilization of ferroelectricity due to charge accumulated at interfaces*, Physical Chemistry Chemical Physics **24**, 5419-5430 (2022). JIF = 3.945, AIS = 0.756.

12. C.M. Teodorescu, M.A. Husanu, *Re-entrant ferromagnetism at ultrahigh temperatures in epsilon-iron as possible origin of the geomagnetic field*, Physics of the Earth and Planetary Interiors **326**, 106856:1-106856:11 (2022). JIF = 2.748, AIS = 0.968.

13. L.E. Abramiuc, L.C. Tanase, A. Barinov, C.F. Chirila, C.M. Teodorescu, *Nanosopic correlations from curve fitting of photoelectron spectromicroscopy data cubes of lead zirconate titanate films*, Results in Physics **36**, 105436:1-105436:9 (2022). JIF = 4.565, AIS = 0.622.

14. L.L. Lev, I.O. Maiboroda, E.S. Grichuk, N.K. Chumakov, N.B.M. Schroeter, M.A. Husanu, T. Schmitt, G. Aeppli, M.L. Zanaveskin, V.G. Valeyev, V.N. Strocov, *Impact of band-bending on the k-resolved electronic structure of Si-doped GaN*, Physical Review Research **4**(1), 013183:1-013183:14 (2022). JIF = 3.900, AIS = 1.762.

15. R.J.B. Leote, E. Matei, N.G. Apostol, M. Enculescu, I. Enculescu, V.C. Diculescu, *Monodispersed nanoplatelets of samarium oxides for biosensing applications in biological fluids*, Electrochimica Acta **402**, 139532:1-139532:11 (2022). JIF = 7.336, AIS = 0.888.

16. A. Pena, *Electron trapping in twisted light driven graphene quantum dots*, Physical Review B **105**(4), 045405:1-045405:11 (2022). JIF = 3.908, AIS = 0.977.

17. A. Pena, *Lifetime enhancement of quasibound states in graphene quantum dots via circularly polarized light*, Physical Review B **105**(12), 125408:1-125408:11 (2022). JIF = 3.908, AIS = 0.977.

18. U. Alli, 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*, Chemical Engineering Journal **430**(4), 132976:1-132976:10 (2022). JIF = 16.744, AIS = 1.758.

19. K.G. Nguyen, I.A. Baragau, R. Gromicova, A. Nicolaev, S. AJ Thomson, A. Rennie, N.P. Power, M. T. Sajjad, S. Kellici, *Investigating the effect of N-doping on carbon quantum dots structure, optical properties and metal ion screening*, Scientific Reports **12**(1), 13806:1-13806:12 (2022). JIF = 4.997, AIS = 1.208.

20. M.A. Husanu, D.G. Popescu, F. Bisti, L.M. Hrib, L.D. Filip, I. Pasuk, R. Negrea, C. Istrate, L. Lev, T. Schmitt, L. Pintilie, A. Mishchenko, C. M. Teodorescu, V.N. Strocov, *Ferroelectricity modulates polaronic coupling at multiferroic interfaces*, Communications Physics **5**(1), 209:1-209:9 (2022). JIF = 6.497, AIS = 2.484.

21. A. Pena, *Electron trapping in magnetic driven graphene quantum dots*, Physica E **141**(11), 115245:1-115245: (2022). JIF = 3.369, AIS = 0.449.

22. C. Palade, A. Slav, I. Stavarache, V.A. Maraloiu, C. Negrila, M.L. Ciurea, *Memory properties of Zr-doped ZrO₂ MOS-like capacitor*, Coatings **12**(9), 1369- (2022). JIF = 3.236, AIS = 0.410.

23. M. Raciulete, F. Papa, I. Atkinson, C. Bradu, C. Negrila, D. Eftemie, D. C. Culita, A. Miyazaki, V. Bratan, J. Pandele-Cusu, C. Munteanu, G. Dobrescu, A. Sandulescu, I. Balint, *Band-gap engineering of layered perovskites by Cu spacer insertion as photocatalysts for depollution reaction*, Catalysts **12**(12), 1529:1-1529:28 (2022). JIF = 4.501, AIS = 0.615.

24. M. Baibarac, T. Burlanescu, M. Stroe, I. Smaranda, C. Negrila, *The photoluminescence and vibrational properties of black phosphorous sheets chemically/ electrochemically functionalized in the presence of diphenylamine*, *Polymers* **14**(21), 4479, (2022), JIF = 4.967, AIS = 0.612.
25. T. Tite, A.C. Popa, B.W. Stuart, H.R. Fernandes, I.M. Chirica, G.A. Lungu, D. Macovei, C. Bartha, L. Albuiescu, 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*, *Journal of Materiomics* **8**(4), 893-905 (2022). JIF = 8.589, AIS = 1.369.
26. M. Zaharescu, M. Anastasescu, H. Stroescu, J.M. Calderon-Moreno, N. Apostol, S. Preda, C.M. Vladut, S. Mihaiu, P. Petrik, M. Gartner, *Comparative study of the dopants (Mn vs. V) influence on the properties of sol-gel ZnO films*, *Journal of Sol-Gel Science and Technology* **104**(1), 67-77 (2022). JIF = 2.606, AIS = 0.297.
27. A. Rendon-Patino, A. Primo, B. Cojocar, S.G. Ion, D.G. Popescu, V. Parvulescu, H. Garcia, *Nanometric-thick metal-free h-boron nitride/graphene films as base catalyst for the synthesis of benzoxazoles*, *ChemCatChem* **14**(12), e202200356:1- e202200356:7 (2022). JIF = 5.501, AIS = 0.949.
28. V.N. Strocov, F. Lechermann, A. Chikina, F. Alarab, L.L. Lev, V.A. Rogalev, T. Schmitt, M.A. Husanu, *Dimensionality of mobile electrons at x-ray-irradiated LaAlO₃/SrTiO₃ interfaces*, *Electronic Structure* **4**(1), 015003:1-015003:13 (2022). JIF = 2.500, AIS = 0.999.
29. A.T. Buruiana, A.E. Bocirnea, A.C. Kuncser, T. Tite, E. Matei, C. Mihai, N. Zawadzka, K. Olkowska-Pucko, L. Kipczak, A. Babinski, M.R. Molas, A. Velea, A.C. Galca, *Layered SnSe nanoflakes with anharmonic phonon properties and memristive characteristics*, *Applied Surface Science* **599**, 153983:1-153983:10 (2022). JIF = 7.392, AIS = 0.848.
30. A.M. Hada, A.M. Craciun, M. Focsan, A.Vulpoi, E.L. Borcan, S. Astilean, *Glutathione-capped gold nanoclusters as near-infrared-emitting efficient contrast agents for confocal fluorescence imaging of tissue-mimicking phantoms*, *Microchimica Acta* **189**(9), 337:1-337:10 (2022). JIF = 6.408, AIS = 0.752.
31. S. Preda, J. Pandele-Cusu, S.V. Petrescu, E.M. Ciobanu, G. Petcu, D.C. Culița, N.G. Apostol, R.M. Costescu, I. Rauț, M. Constantin, L. Predoana, *Photocatalytic and antibacterial properties of doped TiO₂ nanopowders prepared by sol-gel method*, *Gels* **8**(10), 673:1-673:20 (2022). JIF = 4.432, AIS = 0.766.
32. M. Florea, A. Bocirnea, S. Neațu, A.M. Kuncser, M.M. Trandafir, F. Neațu, *Tuning the acidity by addition of transition metal to Mn modified hollow silica spheres and their catalytic activity in ethanol dehydration to ethylene* *Applied Catalysis A* **646**, 118860:1-118860:11 (2022). JIF = 5.723, AIS = 0.859.
33. M.Y. Zaki, F. Sava, I.D. Simandan, A.T. Buruiana, A.E. Bocirnea, C. Mihai, A. Velea, A.C. Galca, *A two-step magnetron sputtering approach for the synthesis of Cu₂ZnSnS₄ films from Cu₂SnS₃/ZnS stacks*, *ACS Omega* **7**(27), 23800-23814 (2022). JIF = 4.132, AIS = 0.630.
34. M.C. Stoian, C. Romanitan, G. Craciun, D.C. Culita, F. Papa, M. Badea, C. Negrila, I. Popescu, I.C. Marcu, *Multicationic LDH-derived Co_xCeMgAlO mixed oxide catalysts for the total oxidation of methane*, *Applied Catalysis A* (2022), *submitted*. JIF = 5.723, AIS = 0.859.
35. A.I. Borhan, D. Gherca, I.A. Ghemes, A.C. Dirtu, D. Dirtu, M.N. Palamaru, D.G. Popescu, M.A. Husanu, A.R. Iordan, *Visible-driven highly efficient photocatalyst based on MWCNTs for total degradation of tetracycline antibiotic*, *Applied Materials Today* (2022), *submitted*. JIF = 8.663, AIS = 1.456.

36. C.M. Teodorescu, *Kittel's model for ferromagnetic domains, revised and completed. Occurrence of hysteresis and derivation of coercive fields*, Results in Physics (2022), submitted. JIF = 4.565, AIS = 0.622.
37. A.I. Borhan, D. Gherca, I.A. Ghemes, A.C. Dirtu, D. Dirtu, M.N. Palamaru, D.G. Popescu, M.A. Husanu, A.R. Iordan, *Visible-driven highly efficient photocatalyst based on MWCNTs for total degradation of tetracycline antibiotic*, Matter (2022), submitted. JIF = 19.967, AIS = 4.641.
38. A.I. Borhan, D.D. Herea, M.A. Husanu, D.G. Popescu, C.N. Borca, T. Huthwelker, G. Bulai, I. Radu, A. Constantin Dirtu, D. Dirtu, C. Mita, G. Stoian, G. Ababei, N. Lupu, A. Pui, D. Gherca, *Straightforward FeOOH nanografting of Al-based SrTiO₃ perovskite material as core-shell nanoflower-like heteronanostructure with enhanced solar light-driven photodegradation capability*, Applied Surface Science (2022), submitted. JIF = 7.392, AIS = 0.848.
39. D.G. Popescu, M.A. Husanu, P.C. Constantinou, L.D. Filip, L. Trupina, C.I. Bucur, I. Pasuk, C. Chirila, V. Stancu, L.M. Hrib, L. Pintilie, T. Schmitt, C.M. Teodorescu, V.N. Strocov, *Experimental band structure of PbZrTiO₃: Mechanism of ferroelectric stabilization*, Advanced Science (2022), submitted. JIF = 17.521, AIS = 3.539.
40. N. Iacob, C. Chirila, A. E. Stanciu A. Kuncser, M. Sangare, M. Socol, C. C. Negrila, M. Botea, C. Locovei, G. Schinteie, A. C. Galca, A. Stanculescu, L. Pintilie, V. Kuncser, B. Borca, *Artificial memory element based on guanine nucleobase*, RSC Advances (2022), submitted. JIF = 4.036, AIS = 0.519.
41. M. Sima, E. Vasile, N. Preda, E. Matei, A. Sima, C. Negrila, *Role of electrophoretic deposited WO₃ underlayer and MIL-101(Fe) co-catalyst in WO₃/BiVO₄ heterojunction for efficient photoelectrochemical water oxidation*, Materials Research Bulletin (2022), submitted. JIF = 5.600, AIS = 0.515.
42. C. Besleaga, A. Kuncser, C. C. Negrila, A. Nutescu, G. E. Stan, *Fourier-transform infrared spectroscopy as a complementary method for phase identification in hafnia-based materials*, Applied Surface Science (2022), submitted. JIF = 7.392, AIS = 0.848.
43. M. E. Fergani, N. Candu, I. Podolean, B. Cojocar, A. Nicolaev, C. M. Teodorescu, M. Tudorache, V. I. Parvulescu and S. M. Coman *Catalytic hydrotreatment of humins waste over bifunctional Pd-based zeolite catalysts* Catalysts , 12(10) 1202 (2022), JIF = 4,501, AIS = 0,615.

2.12.5 BREVETE/ CERERI DE BREVET SOLICITATE

	Nr
a. Realizate în anul 2022	3/4
b. Planificate a se realiza în anul 2023	3/4

Indexed / Published / Accepted / Submitted Patents

1. C. Cotîrlan-Simioniuc, *Fototranzistor unijonctiune iluminat transversal cu metasuprafață integrată*, CBI A/00080/16.05.2022.
2. C. Cotîrlan-Simioniuc, I. R. Șchiopu, *Celulă solară tandem cu o structură metal-oxid-semiconductor si metasuprafață integrate*, CBI A/00434/21.07.2022.
3. C. Cotîrlan-Simioniuc, *Ochelari cu metasuprafețe plasmonice*, Brevet nr. 132835/30.06.2022.
4. C. Cotîrlan-Simioniuc, A. Rizea, D. V. Ursu, *Dispozitiv optoelectronic cu metasuprafața configurabilă electric pentru controlul polarizării luminii*, Hotararea OSIM nr. 44/82 din 30.05.2022, brevet nepublicat inca in BOPI.

5. C. Cotîrlan-Simioniuc, *Superlens for continuously changing direction or focus of refracted optical beam, has transparent dielectric substrate successively coated with continuous gold layer, insulating silica layer, non-degenerate n-type semiconductor layer and surface with parallel rectangular gold elements*, RO135497-A2 / 28 Jan 2022.

6. Petre Badica, Mihai Alexandru Grigorescu, Mihail Burdusel, Ruxandra Costescu, *Compozite stratificate pe baza de folii de plastic reciclate din ambalaje*, CBI A/00516/25.08.2022.

7. A. Slav, T. Stoica, I.M. Dascalescu, C. Palade, G.A. Lungu, *Procedeu de obținere a unui film subțire de GeSn pasivat cu fotosensibilitate crescută în SWIR*, CBI A/00646/18.10.2022.

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

Pe termen scurt (2023):

(1) Perfecționarea unui dispozitiv de măsurări in situ a proprietăților de conducție electrică pentru sistemele sintetizate prin metode ale fizicii suprafețelor. Aceste măsurători sunt din ce în ce mai solicitate de comunitatea internațională, iar accesul la ele coroborat cu caracterizarea suprafețelor în condiții de curățenie extremă oferă informații imposibil de obținut prin alte metode. Grupul nostru a efectuat experiențe de pionierat privind histerezisul rezistenței straturilor grafenice depuse pe substraturi feroelectrice, măsurate in situ, folosind un dispozitiv “de unică folosință” la Elettra, Trieste. Intenționăm să dezvoltăm un sistem versatil, care să ofere rezultate reproductibile pe o gamă largă de suprafețe și materiale bi-dimensionale. Este necesară achiziționarea de manipuloare XYZ, treceri de curent pentru ultravid și adaptarea unui dispozitiv la atelierul mecanic, cost estimat cca. 50 000 lei.

(2) Va trebui ca instalația să se doteze cu o nouă sursă de alimentare pentru manipuloarele de probe (înalță tensiune + curent filament). În momentul de față dispunem de 4 manipuloare (câte unul pentru camerele de analiză și MBE în fiecare din instalațiile CoSMoS și Multimetodă) și numai trei surse de alimentare, care sunt folosite alternativ. Noua sursă de alimentare costă cca. 15 000 lei.

(3) Trebuie în mod periodic schimbate pompele scroll și, uneori, pompele turbomoleculare, așadar trebuie rezervat pentru aceste schimburi cca. 60 000 lei.

Pe termen mediu (2023-2024):

(1) Încălzirea standard prin bombardament electronic nu funcționează atunci când se intenționează să se efectueze tratamente termice în gaze reactive (oxigen, de exemplu), deoarece se arde filamentul. Intenționăm să dezvoltăm un sistem de încălzire radiativă din exterior pentru asemenea necesități, din ce în ce mai solicitate de comunitatea științifică. Cost estimat 100 000 lei.

(2) Foarte mulți utilizatori din domeniile emergente ale nanodot-urilor cuantice, izolatorilor topologici și alte materiale 2D sau a magnetismului solicită posibilitatea efectuării de măsurători la temperaturi foarte scăzute. Manipuloarele actuale permit atingerea de temperaturi de 80 K prin răcire cu azot lichid, însă o mare varietate de fenomene și tranziții de fază au loc la temperaturi mai scăzute. Este necesar adaptarea sistemului actual de transfer și mișcare a probelor pe un criostat cu He lichid, în circuit închis. Această facilitate, montată pe instalația CoSMoS, ar atrage foarte mulți utilizatori internaționali, cu posibil impact în publicații cu factor de impact extrem de ridicat. Cost estimat 120.000 lei.

(3) Electronica de control a celor două microscopie de baleiaj cu efect tunel (STM) este depășită moral, fiind la nivelul anilor 2007-2009. În prezent, există noi ansambluri electronice multifuncționale de pilotare a acestor tip de microscopie, cu nivel de zgomot cu multe ordine de mărime mai redus. Achiziționarea unor astfel de ansambluri ar simplifica foarte mult procesul de

obținere a imaginilor STM cu rezoluție atomică, proces care de multe ori este perturbat serios de zgomotul electronic. Între timp, producătorul instalațiilor STM a oferit această electronică nouă coroborată cu up-grade-ul instalațiilor STM la SPM (scanning probe microscopy, incluzând atomic force microscopy, AFM și tehnici asociate) cu rezoluție atomică. Efectuarea acestor achiziții ar permite studierea cu rezoluție atomică a suprafețelor nu numai ale materialelor conductoare, ca în prezent, ci și a semiconductorilor și izolatoarelor, cu implicații enorme în cunoașterea materialelor noi pentru electronică, microelectronică, senzorială etc. Cost estimat 500 000 lei pentru un upgrade, 1 000 000 lei pentru upgrade-ul ambelor instalații STM.

Pe termen mediu-lung (2024-2025):

(1) Ranforsarea colaborărilor cu facilitățile de radiație de sincrotron

Mentținerea 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). 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 academice și industriale 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. Costul estimat al participării la o linie de fascicul este de cca. 10 milioane lei.

(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. 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. Nemaivorbind 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 nu vor mai fi împrăștiați de gaz, fiind deci detectați.

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 de o nouă generație în ceea ce privește micro-focalizarea razelor X care 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.

Instalația de spectroscopie de fotoelectroni la presiune apropiată de cea ambiantă (NAP-XPS) va 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 exobiologie; (xv) acoperiri și straturi subțiri sensibile.

Costul estimat al unei instalații moderne NAP-XPS este de cca. 8 milioane lei.

**DIRECTOR GENERAL/
RECTOR**

**CS1 Dr. Ionuț Marius
Enculescu**

DIRECTOR ECONOMIC

Ec. Gabriela Ivănuș

RESPONSABIL IOSIN

**CS1 Dr. abil. Cristian Mihail
Teodorescu**