

RECEPȚIONAT

Ministerul Educației și Cercetării

____ 2025**AVIZAT**

Secția Academiei de Științe a Moldovei

____ 2025**UNIVERSITATEA DE STAT DIN MOLDOVA**

(denumirea organizației de drept public din domeniile cercetării și inovării)

INSTITUTUL DE FIZICĂ APLICATĂ

(denumirea unității de cercetare)

RAPORT ȘTIINȚIFIC ANUAL**pentru etapa 2024****privind realizarea subprogramului de cercetare în cadrul
programului instituțional de cercetare al organizației (2024-2027)****Titlul subprogramului INGINERIA MATERIALELOR NANOSTRUCTURATE
FUNCȚIONALE PE BAZA SI, SIGE, ZNO, INGAALN, SNO₂ ȘI IN₂O₃****Prioritatea strategică Tehnologii inovative, energie sustenabilă, digitalizare****Codul subprogramului 011208**

Directorul unității de cercetare

SIKIMAKA Olga

(numele, prenumele)

(semnătura)Coordonatorul subprogramului
de cercetareNICA Denis

(numele, prenumele)

(semnătura)

Chișinău, 2025

CUPRINS:

1.	Scopul și obiectivele etapei 2024	3
2.	Acțiunile planificate pentru etapa 2024	3
3.	Acțiunile realizate în 2024	3
4.	Rezultatele obținute	3
5.	Impactul științific, social și/ sau economic al rezultatelor științifice obținute	8
6.	Diseminarea rezultatelor obținute în subprogram în formă de publicații	8
7.	Diseminarea rezultatelor obținute în subprogram în formă de prezentări la foruri științifice	8
8.	Promovarea rezultatelor cercetărilor obținute în subprogram în mass-media	8
9.	Colaborare la nivel național și internațional	8
10.	Teze de doctorat/ postdoctorat susținute și confirmate în anul 2024 de membrii echipei subprogramului	8
11.	Dificultăți în realizarea subprogramului (financiare, organizatorice, legate de resursele umane etc.)	9
12.	Concluzii	9
13.	Anexe	10
	Anexa nr. 1. <i>Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în subprogram în anul 2024 (în limba română și în limba engleză)</i>	10
	Anexa nr. 2. <i>Lista lucrărilor științifice, științifico-metodice și didactice publicate în anul 2024 în cadrul subprogramului de cercetare</i>	12
	Anexa nr. 3. <i>Componența echipei de cercetare a subprogramului</i>	14

1. Scopul și obiectivele etapei 2024

- Cercetarea teoretică a proprietăților structurale, electronice, fononice și termoconductibile ale oxidului cristalin In_2O_3 cu defecte biatomice Pb-Tl;
- Dezvoltarea modelului conductibilității termice fononice în nanofirele de germaniu și studierea teoretică a proprietăților termoconductibile ale lor.

2. Acțiunile planificate pentru etapa 2024

- Adaptarea aplicațiilor de calcul dezvoltate anterior de noi pentru studierea proprietăților fizice ale oxizilor In_2O_3 cu defecte de Ga și Zn, pentru cercetarea planificată a proprietăților structurale, electronice, fononice și de conductibilitate termică fononică ale oxizilor In_2O_3 cu defecte biatomice Pb-Tl;
- Calculul numeric și studiul teoretic al spectrelor energetice electronice și fononice în $\text{In}_2\text{O}_3\text{:Pb-Tl}$;
- Calculul numeric al conductibilității termice fononice în $\text{In}_2\text{O}_3\text{:Pb-Tl}$ și studiul teoretic al dependenței de temperatură a ei;
- Aplicarea modelului Face-centered-cubic cell pentru calculul și studiul teoretic al spectrelor energetice ale fononilor în nanofirele de germaniu;
- Calculul numeric și studiul teoretic detaliat al dependenței conductibilității termice a nanofirelor de temperatură, diametrul nanostructurilor și calitatea interfețelor lor.

3. Acțiunile realizate în 2024

- Funcționalitatea aplicațiilor de calcul a fost extinsă cu posibilitatea de a calcula structura cristalină, spectrele energetice electronice și fononice, precum și conductibilitatea termică de rețea a oxizilor In_2O_3 cu defecte biatomice Pb-Tl;
- În cadrul teoriei funcționalului de densitate a stărilor au fost calculate numeric și studiate teoretic proprietățile electronice, fononice și de conductibilitate termică fononică ale oxizilor $\text{In}_2\text{O}_3\text{:Pb-Tl}$;
- În cadrul modelului Face-centered-cubic cell au fost calculate numeric și studiate teoretic proprietățile fononice și de conductibilitate termică fononică ale nanofirelor de germaniu.

4. Rezultatele obținute

4.1. Proprietățile electronice, fononice și termoconductibile ale oxizilor $\text{In}_2\text{O}_3\text{:Pb-Tl}$

Calcululele teoretice *ab initio* a proprietăților fononice ale In_2O_3 cu impurități biatomice Pb-Tl au fost efectuate în baza formalismului funcționalului de densitate (density functional theory (DFT)), iar proprietățile termice au fost calculate în cadrul ecuației de transport linearizate Peierls-Boltzmann, luând în considerare toate canalele posibile de împrăștiere 3-fononică.

Structura oxidului In_2O_3 cu defectul biatomic Pb-Tl este prezentată în Figura 1.

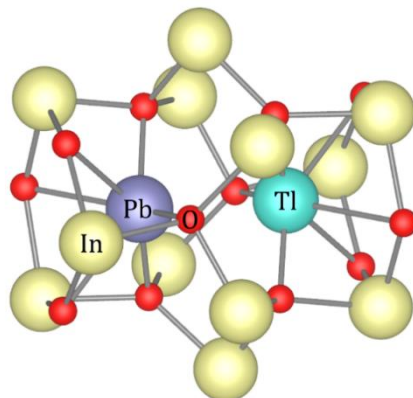


Figura 1. Structura de tip colivie, care conține defectul punctiform Pb-Tl format după relaxare.

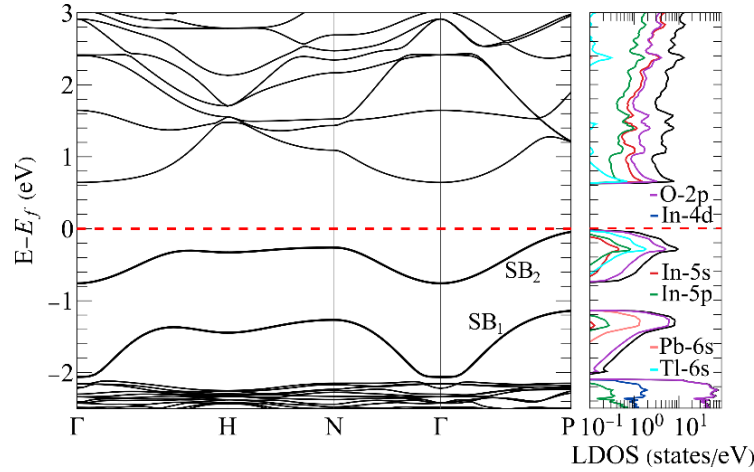


Figura 2. Spectrele energetice ale electronilor în $\text{In}_2\text{O}_3\text{:Pb-Tl}$.

Introducerea atomilor de Pb și Tl induce schimbări semnificative în structura de benzi electronice a In_2O_3 . Două subbenzi, SB_1 și SB_2 , apar în banda interzisă a $\text{In}_2\text{O}_3\text{:Pb-Tl}$ (IPTIO) (vezi Figura 2). Aceste subbenzi, complet ocupate de electroni, au lățimi energetice de aproximativ 0.7 eV, așa cum este indicat de poziția nivelului Fermi. Calculul LDOS relevă, că SB_1 este predominant formată din orbitaliile O-2p, Pb-6s și In-5p, în timp ce SB_2 provine în principal din orbitaliile O-2p, Tl-6s și In-5p. Banda de conducție (BC) este compusă în principal din orbitaliile O-2p și In-5s. Un interval de energie de aproximativ 0,6 eV între SB_2 și BC ne sugerează, că structura subbenzii prezintă un comportament semiconductor de bandă îngustă.

Calcululele noastre au arătat, că atât atomul de Tl, cât și cel de Pb, sunt localizați în poziții interstițiale, iar atomul de Pb având rolul unui „rattler”. Redistribuirea densității electronice în jurul impurității modifică legăturile de forță interatomice cu vecinii. Drept rezultat, așa cum este evidențiat și în Fig. 3, apar modificări semnificative ale spectrului fononic, inclusiv aplatizarea ramurilor fononice, localizarea lor spațială și reducerea vitezelor medii de grup a fononilor.

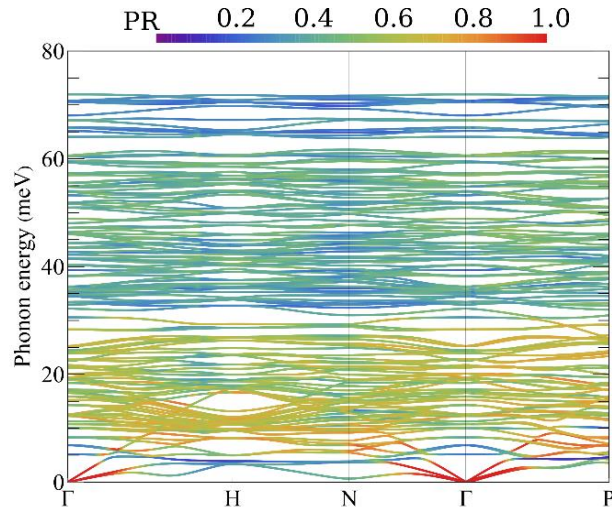


Figura 3. Spectrul vibrațional al In_2O_3 cu impuritatea biatomică Pb-Tl.

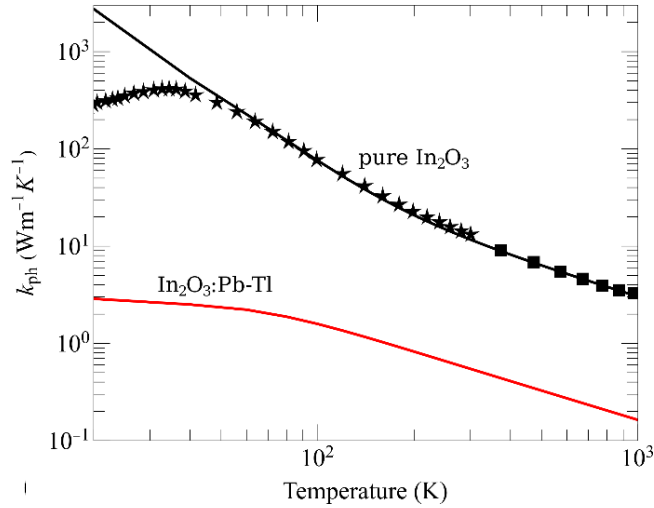


Figura 4. Conductibilitatea termică fononică a In_2O_3 cu impuritatea biatomică Pb-Tl.

Din Fig. 4 se observă, ca vibrațiile de tip „rattling” influențează puternic capacitatea de transport termic a In_2O_3 cu impuritatea Pb-Tl, reducând conductibilitatea termică fononică la temperatura camerei de aproximativ 14 ori comparativ cu In_2O_3 pur. Aceste rezultate teoretice demonstrează posibilitatea ingineriei conductibilității termice în compușii pe bază de oxid de indiu prin dopaj cu Pb și Tl, și pot duce la aplicații practice ale acestora în termoelectricitate.

4.2. Fononii și conductibilitatea termică de rețea în nanofirele de germaniu

Modele fononice în nanofirele (NF) de germaniu au fost calculate în cadrul modelului „Face-centered-cubic cell” (FCC) al oscilațiilor rețelei cristaline. În cadrul acestui model două rețele cu fețe centrate ale germaniului se suprapun și se cercetează oscilațiile rețelei rezultante cu fețe centrate, în care masa fiecărui nod (atom) este egală cu masa dublă a atomului de germaniu.

Vom considera, că axa Z a sistemului de coordonate cartezian coincide cu axa nanofirului. Datorită confinamentului spațial al oscilațiilor în planul secțiunii transversale a NF, atomii, situați în planul secțiunii transversale, nu sunt echivalenți din punct de vedere translațional. Elementul translațional în modelul FCC este format din două straturi atomare, situate la distanța $a/2$ unul de celălalt, unde a – constanta rețelei. Vectorul deplasării oricărui atom al NF poate fi exprimat prin intermediul vectorului de deplasare a atomului corespunzător lui din elementul translațional: $\vec{U}(i, j, k; q, t) = \vec{w}(i, j; q) \cdot \exp(i(\omega t - qh_k))$, unde ω – pulsația oscilațiilor, t – timpul, q – vectorul de undă ($q(0,0,q)\text{PZ}$), iar h_k – este distanța dintre atomul cercetat (i, j, k) și atomul echivalent cu el (i, j), situat în elementul translațional. Indicii i, j, k numerotează straturile atomice de-a lungul axelor X, Y și Z, corespunzător. Introduscând numerotarea unică a atomilor elementului de translație (i, j) $\rightarrow s = 1, 2, \dots, N_{\max}$, putem prezenta sistemul de ecuații ale mișcării acestor atomi în forma:

$$\omega^2 w_l(s; q) = \sum_{s', k=x,y,z} D_{lk}(s, s'; q) w_k(s'; q), \quad l = x, y, z, \quad (1)$$

unde $D_{lk}(s, s'; q) = \frac{1}{m} \Phi_{lk}(s, s'; q) \cdot \exp(i \cdot h_{ss'} \cdot q)$ - sunt componentele matricei dinamice a sistemului cercetat, $\Phi_{ij}(s, s'; q)$ - componenta potențialului de interacțiune dintre atomii s și s' ; $h_{ss'}$ – distanța dintre straturile atomare, în care sunt situați acești atomi, iar m – este masa atomului.

În modelul prezentat am ținut cont de interacțiunea fiecărui atom cu atomii primei sfere (cea mai apropiată) și celei de-a doua sfere de coordinație. De aceea în ecuația (1) sumarea se face după toți atomii s' , care sunt situați în prima și în cea de-a doua sfere atomice în raport cu atomul s . Coordonatele acestor atomi în raport cu atomul s sunt prezentate în Tabelul 1.

Tabelul 1. Coordonatele atomilor primei și celei de-a doua sfere de interacțiune pentru atomul s , având coordonatele $(0,0,0)$.

Prima sferă de interacțiune	$a/2(1,1,0); a/2(1,-1,0); a/2(-1,1,0); a/2(-1,-1,0);$ $a/2(1,1,1); a/2(1,-1,1); a/2(-1,1,1); a/2(-1,-1,1);$ $a/2(1,1,-1); a/2(1,-1,-1); a/2(-1,1,-1); a/2(-1,-1,-1)$
A doua sferă de interacțiune	$a(1,0,0); a(-1,0,0); a(0,1,0); a(0,-1,0); a(0,0,1); a(0,0,-1)$

Interacțiunea cu atomii primei sfere este modelată cu ajutorul potențialului central simetric $\Phi_{lk}(s, s'; q) = -\alpha_1 \hbar / h^2$, unde $\vec{h}$ – este vectorul, orientat de la atomul s spre atomul s' , α_1 – este constanta de interacțiune. Interacțiunea cu atomii din cea de-a doua sferă de coordinație nu este central simetrică și este caracterizată de două constante de interacțiune α и β :

$$\begin{aligned}\Phi_{lk}(0, \vec{h}^2 = a(\pm 1, 0, 0)) &= \delta_{lk} \gamma_{ll}, \gamma_{11} = \alpha; \gamma_{22} = \gamma_{33} = \beta; \\ \Phi_{lk}(0, \vec{h}^2 = a(0, \pm 1, 0)) &= \delta_{lk} \gamma_{ll}, \gamma_{11} = \gamma_{33} = \beta; \gamma_{22} = \alpha; \\ \Phi_{lk}(0, \vec{h}^2 = a(0, 0, \pm 1)) &= \delta_{lk} \gamma_{ll}, \gamma_{11} = \gamma_{22} = \beta; \gamma_{33} = \alpha.\end{aligned}\quad (2)$$

În ecuația (2), δ_{lk} - este delta-simbolul Kronecker. Cele trei constante de forță pot fi exprimate prin intermediul constantelor elastice c_{11} , c_{12} și c_{44} ale cristalului volumetric:

$$\begin{aligned}\alpha_1 &= a(c_{12} + c_{44}) / 2, \\ \alpha &= a(c_{11} - c_{12} - c_{44}) / 4, \\ \beta &= a(c_{44} - c_{12}) / 8.\end{aligned}\quad (3)$$

În nanofire modele fononice se împart în 4 grupuri (4 polarizări): *dilatational*, *flexural₁*, *flexural₂* и *shear*. Toate aceste mode formează un sistem complet de mode fononice în nanofire.

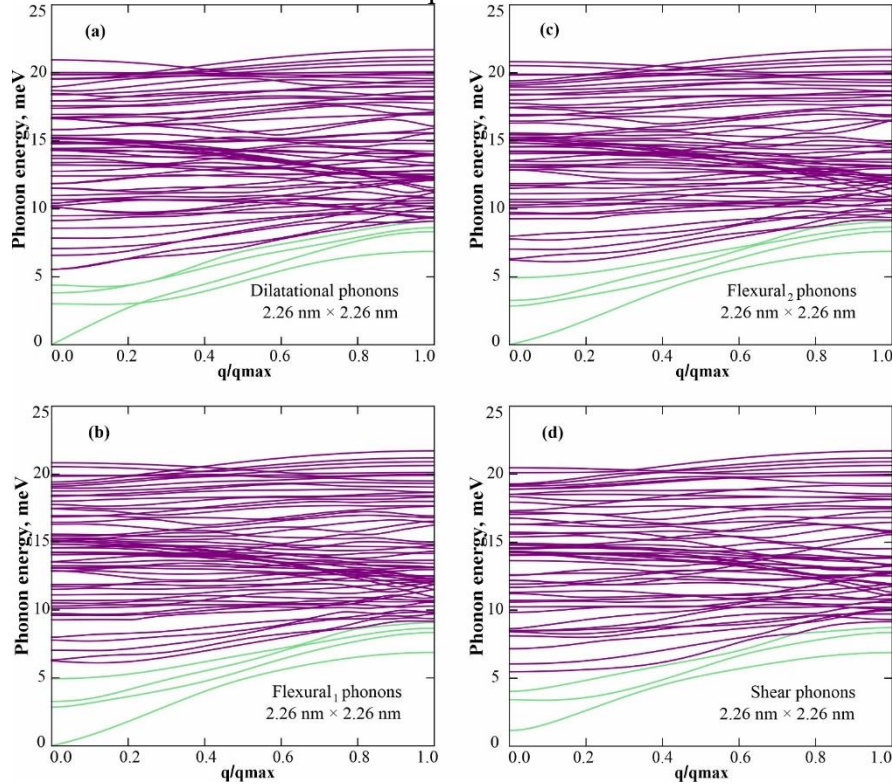


Figura 5. Dispersia energiei fononilor în nanofirul cu secțiunea transversală $9 \text{ ML} \times 9 \text{ ML}$ ($2.26 \text{ nm} \times 2.26 \text{ nm}$). Panourile (a), (b), (c) și (d) corespund polarizărilor *dilatational*, *flexural₁*, *flexural₂* și *shear*.

În Fig. 5 sunt prezentate curbele de dispersie pentru fononii *dilatational* (a), *flexural*₁ (b), *flexural*₂ (c) și *shear* (d) în nanofirul cu secțiune transversală pătrată $d_x \times d_y = 9 \text{ monolayers (ML)} \times 9 \text{ monolayers}$ (2,26 nm $\times$ 2,26 nm).

Curbele de dispersie se caracterizează printr-un mers nemonoton și un număr mare de maximumuri și minimumuri locale. Acest lucru se explică prin manifestarea concomitentă a efectului de limitare spațială a fononilor și a caracterului transversal-longitudinal al modele fononice. Vectorul de deplasare pentru fiecare mod fononic în nanofire posedă atât componenta longitudinală $w_z(s; q)$, cât și componentele transversale $w_x(s; q)$ și $w_y(s; q)$. De aceea vectorul deplasării $\vec{w}(s; q)$ este direcționat sub un oarecare unghi α față de vectorul $\vec{q}$. Modele fononice, la care $\alpha \sim 0^\circ$ (90°), sunt de tip longitudinal (de tip transversal); toate celelalte mode demonstrează proprietăți mixte transversal-longitudinale.

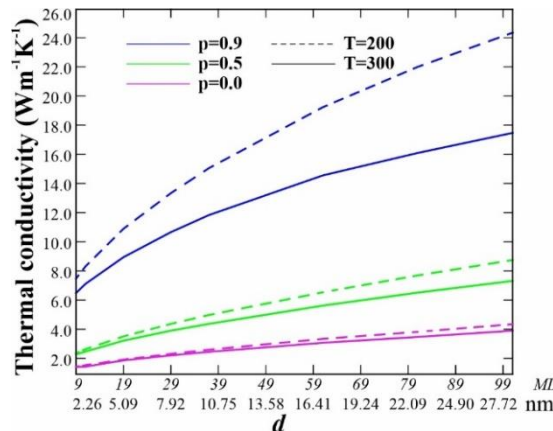


Figura 6. Dependența conductibilității termice de rețea în nanofirele de germaniu cu secțiune transversală pătrată, în dependență de lungimea d a laturii pătratului. Este prezentată conductibilitatea termică pentru diferite valori ale parametrului de specularitate: $p = 0$; 0.5 și 0.9 și două temperaturi diferite: $T = 200 \text{ K}$ și $T = 300 \text{ K}$.

În Figura 6 este prezentată dependența conductibilității termice a nanofirelor de germaniu cu secțiune transversală pătrată, de lungimea laturii $d = d_x = d_y$. Conductibilitatea termică a fost calculată pentru NF cu secțiunea transversală de la 9 ML $\times$ 9 ML (2,26 nm $\times$ 2,26 nm) până la 99 ML $\times$ 99 ML (27,72 nm $\times$ 27,72 nm). Sunt prezentate graficele pentru trei valori ale parametrului de specularitate a suprafeței: $p=0$; 0.5 și 0.9 – curbele de culoare violetă, verde și albastră, corespunzător, cât și pentru două valori ale temperaturii: $T = 200 \text{ K}$ (curbele întrerupte) și $T = 300 \text{ K}$ (curbele continue). Odată cu majorarea secțiunii transversale, conductibilitatea termică a NF crește, deoarece crește numărul de atomi, care participă în transportul de căldură. Însă chiar și în cazul celui mai masiv NF din cele cercetate, având secțiunea transversală 27,72 nm $\times$ 27,72 nm, în dependență de p ea este de 3 – 20 ori mai joasă decât conductibilitatea termică a germaniului volumetric: $K_{\text{Ge}} = 64 \text{ W/mK}$. Astfel se manifestă atât efectul de micșorare a vitezei de grup a fononilor în NF, cât și de împăștiere suplimentară a fononilor pe frontierele structurii.

Pentru toate dimensiunile cercetate ale NF și pentru toate valorile acceptate ale parametrului p , conductibilitatea termică la temperatura $T = 200 \text{ K}$ este mai înaltă, decât la $T = 300 \text{ K}$. Micșorarea conductibilității termice odată cu creșterea temperaturii este cauzată de intensificarea proceselor de împrăștiere Umklapp a fononilor. Pentru $p = 0.9$ diferența dintre conductibilitățile termice la temperaturile $T = 200 \text{ K}$ și $T = 300 \text{ K}$, este mai vizibilă și atinge 16 % pentru NF cu secțiunea 9 ML $\times$ 9 ML și 28 % pentru NF cu secțiunea 99 ML $\times$ 99 ML. La micșorarea valorii lui p diferența în valorile conductibilității termice devine mai mică. Acest lucru este cauzat de faptul, că la micșorarea lui p împrăștierea superficială a fononilor se amplifică, ducând la atenuarea influenței proceselor Umklapp asupra conductibilității termice, drept urmare dependența conductibilității termice de temperatură devine mai slabă.

5. Impactul științific, social și/sau economic al rezultatelor științifice obținute

Impactul științific fundamental al rezultatelor obținute este legat de obținerea cunoștințelor fundamentale noi despre procesele electronice, fononice și termice, care se petrec în oxizii In_2O_3 cu defecte biatomare Pb-Tl și în nanofirele de germaniu. Am demonstrat, că atât nanofirele de germaniu, cât și oxizii In_2O_3 :Pb-Tl posedă valori scăzute ale conductivității termice. Aplicarea practică a rezultatelor obținute ar putea contribui atât îmbunătățirii parametrilor de lucru ai convertorilor termoelectrice existenți, cât și apariției unei clase noi de materiale termoizolante. Acesta ar fi posibilul impact economic al proiectului. Rezultatele obținute vor fi de asemenea utilizate la actualizarea cursurilor, ținute de participanții subprogramului în cadrul Facultății de Fizică și Inginerie a Universității de Stat din Moldova, lucru care, la rândul său, va contribui la îmbunătățirea nivelului de pregătire al generațiilor noi de fizicieni ai Republicii Moldova.

6. Diseminarea rezultatelor obținute în subprogram în formă de publicații

- Articole în reviste științifice din bazele de date Web of Science / SCOPUS – 8 articole
- Teze în lucrările conferințelor științifice internaționale din Republica Moldova – 5 teze.

7. Diseminarea rezultatelor obținute în subprogram în formă de prezentări la foruri științifice.

Nu sunt

8. Promovarea rezultatelor cercetărilor obținute în subprogram în mass-media

- Emisiuni radio/TV de popularizare a științei
 - Denis Nica / Eroul vremurilor noastre / Cercetări în domeniul fizicii în Republica Moldova.
Link: <https://canal5.md/ro/2024/01/15/geroj-nashego-vremeni-denis-nika-2/>

9. Colaborare la nivel național și internațional

Au fost efectuate colaborări științifice cu următoarele echipe de cercetători:

- echipa de cercetători condusă de dr. S. Vatavu (USM, Moldova): efectuarea analizei XRD a peliculelor subțiri în sistemul In-O-Zn;
- echipa de cercetători condusă de prof. A. A. Balandin (Universitatea din California – Los-Angeles, SUA): pregătirea articolului de sinteză despre proprietățile fononice și termice ale nanomaterialelor pe baza grafenului.

10. Teze de doctorat/ postdoctorat susținute și confirmate în anul 2024 de membrii echipei subprogramului

Autorul tezei	Tema tezei de doctor	Conducător științific / Consultant științific	Specialitatea	Data susținerii tezei
ISACOVA Calina	Exciton and phonon properties in quantum dot nanostructures / Proprietățile excitonice și fononice ale nanostructurilor formate din puncte cuantice	dr. hab., conf. univ., Nica Denis	131.04 - fizica computațională și modelarea proceselor	09.02.2024
ASCHEROV Artur	Молекулярно-динамическая теория „Valence Force Field” для алмазоподобных гетероструктур и графеновых слоёв: энергетические спектры	dr. hab., prof. univ., membru-corr. Pokatilov Evghenii /	131.04 - fizica computațională și modelarea proceselor	28.05.2024

	фононов и теплопроводность / Teoria molecular-dinamică „Valence Force Field” a heterostructurilor de tipul diamant și a straturilor de grafen: spectrele energetice ale fononilor și conductibilitatea termică	dr. hab., conf. univ., Nica Denis		
--	--	---	--	--

11. Dificultăți în realizarea subprogramului (financiare, organizatorice, legate de resursele umane etc.)

Nu sunt

12. Concluzii

În prima etapă a implementării subprogramului (anul 2024), au fost studiate teoretic proprietățile structurale, electronice și fononice ale oxizilor In_2O_3 cu defecte biatomice Pb-Tl, precum și conductibilitatea termică a nanofirelor de germaniu. S-a demonstrat, că defectele biatomice Pb-Tl influențează semnificativ proprietățile structurale, electronice și de conductibilitate termică fononică ale In_2O_3 . Astfel de defecte micșorează considerabil interacțiunile interatomice în rețeaua cristalină, ceea ce duce la creșterea amplitudinii de deplasare a atomilor din poziția de echilibru. În spectrul fononic au fost identificate moduri fononice localizate, cu energie redusă, asociate cu Pb și Tl, care intensifică dispersia fononilor, ceea ce, la rândul său, reduce conductibilitatea termică fononică în comparație cu conductibilitatea termică a In_2O_3 pur. De asemenea am arătat, că în nanofirele de germaniu cu diametrul de 5–50 nm are loc o împrăștiere intensă a fononilor pe suprafața nanofirelor, ceea ce determină o scădere semnificativă a conductibilității termice în comparație cu germaniul volumetric.

Rezultatele obținute arată, că atât oxizii $\text{In}_2\text{O}_3\text{:Pb-Tl}$, cât și nanofirele de germaniu, sunt potențial promițătoare pentru aplicațiile termoelectrice și termoizolante.

Coordonatorul subprogramului
de cercetare

NICA Denis
(numele, prenumele)

(semnătura)

Data: 30.01.2025

Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în subprogram în anul 2024
INGINERIA MATERIALELOR NANOSTRUCTURATE FUNCȚIONALE
PE BAZA SI, SIGE, ZNO, INGAALN, SNO₂ ȘI IN₂O₃
 (denumirea subprogramului)

Codul subprogramului **011208**

În prima etapă a implementării subprogramului 011208 „*Ingineria materialelor nanostructurate funcționale pe baza Si, SiGe, ZnO, InGaAlN, SnO₂ și In₂O₃*” (anul 2024), au fost studiate teoretic proprietățile structurale, electronice și fononice ale oxizilor In₂O₃ cu defecte biatomice Pb-Tl, precum și conductibilitatea termică a nanofirelor de germaniu.

S-a demonstrat, că defectele biatomice Pb-Tl influențează semnificativ proprietățile structurale, electronice și de conductibilitate termică fononică ale In₂O₃. Astfel de defecte micșorează considerabil interacțiunile interatomice în rețeaua cristalină, ceea ce duce la creșterea amplitudinii de deplasare a atomilor din poziția de echilibru. În spectrul fononic au fost identificate moduri fononice localizate, cu energie redusă, asociate cu Pb și Tl, care intensifică dispersia fononilor, ceea ce, la rândul său, reduce conductibilitatea termică fononică în comparație cu conductibilitatea termică a In₂O₃ pur.

De asemenea am arătat, că în nanofirele de germaniu cu diametrul de 5–50 nm are loc o împrăștiere intensă a fononilor pe suprafața nanofirelor, ceea ce determină o scădere semnificativă a conductibilității termice în comparație cu germaniul volumetric: de 3-20 de ori, în funcție de temperatură și de rugozitatea suprafeței.

Rezultatele obținute arată, că atât oxizii In₂O₃:Pb-Tl, cât și nanofirele de germaniu, sunt potențial promițătoare pentru aplicațiile termoelectrice și termoizolante.

Pe baza rezultatelor științifice obținute în cadrul subprogramului, în anul 2024 au fost publicate **8 articole** în reviste științifice internaționale cu *factor de impact ISI* și **5 teze** la lucrările conferințelor științifice internaționale.

Coordonatorul subprogramului
de cercetare

NICA Denis
(numele, prenumele)

(semnătura)

Data: 30.01.2025

Summary of Activity and Results Obtained in Subprogram in 2024
ENGINEERING OF FUNCTIONAL NANOSTRUCTURED MATERIALS
BASED ON SI, SIGE, ZNO, INGAALN, SNO₂, AND IN₂O₃
(Subprogram Name)

Subprogram Code **011208**

Within the initial stage of implementing subprogram 011208 "*Engineering of functional nanostructured materials based on Si, SiGe, ZnO, InGaAlN, SnO₂, and In₂O₃*" (year 2024) we theoretically studied the structural, electronic, and phonon properties of In₂O₃ oxides with Pb-Tl biatomic defects, as well as the thermal conductivity of germanium nanowires.

It was demonstrated that Pb-Tl defects significantly affect the structural, electronic, and thermal conduction properties of In₂O₃. Such defects substantially weaken interatomic interactions in the crystal lattice, leading to an increase in the amplitude of atomic displacements from their equilibrium positions. Localized low-energy phonon modes associated with Pb and Tl were identified in the phonon energy spectra. These modes enhance phonon scattering, which, in turn, reduces the phonon thermal conductivity compared to the thermal conductivity of bulk In₂O₃.

Additionally, it was shown that in germanium nanowires with diameters ranging from 5 to 50 nm, strong phonon scattering at the nanowire surface occurs, resulting in a significant reduction of thermal conductivity compared to bulk germanium: by a factor of 3 to 20, depending on the temperature and surface roughness.

The obtained results confirm that both In₂O₃: Pb-Tl oxides and germanium nanowires are potentially promising candidates for thermoelectric and thermal insulation applications.

The results of the project were published in **8 research articles** in international journals with ISI impact factor and **5 abstracts** in proceedings of international conferences.

Research Subprogram
Coordinator

NICA Denis
(surname, first name)

(signature)

Date: 30.01.2025

**Lista lucrărilor științifice, științifico-metodice și didactice
publicate în anul 2024 în cadrul subprogramului de cercetare**

**INGINERIA MATERIALELOR NANOSTRUCTURATE FUNCȚIONALE
PE BAZA SI, SIGE, ZNO, INGAALN, SNO₂ ȘI IN₂O₃
(denumirea subprogramului)**

Codul subprogramului **011208**

4. Articole în reviste științifice

4.1. în reviste din bazele de date Web of Science și SCOPUS

- BRYNZARI, V.; KOROTCENKOV, Gh.; SHAPOVAL, O.; BORIS, I.; VATAVU, S.; NIKA, D.L. XRD study of structure transformations in Zn–In–O nanocomposite thin films prepared by spray pyrolysis method. *Physics of the Solid State*. 2024, vol. 66, pp. 31-37. Springer Nature,
<https://doi.org/10.1134/S1063783424600596> (FI = 0.9)
- COCEMASOV, A.; NIKA, D.L. Thermal conduction in planar Si/Ge superlattices: role of the phonon interface scattering. *Semiconductors*. 2024, vol. 58 (12), pp. 936-947. Springer Nature,
<https://doi.org/10.1134/S106378262460253X> (FI = 0.6)
- KOROTCENKOV, Gh. I–VI Semiconductor-Based Conductometric Gas Sensors: Is There a Future for These Sensors? *Sensors*. 2024, vol. 24 (12), p. 3861. MDPI,
<https://doi.org/10.3390/s24123861> (FI = 3.4)
- NIKA, D.L.; COCEMASOV, A.I.; KLUYKANOV, A.A. Electron-phonon coupling from first principles. *Semiconductors*. 2024, vol. 58(12), pp. 960-963. Springer Nature,
<https://doi.org/10.1134/S1063782624602541> (FI = 0.6)
- PAVLIKOV, A.V.; SHARAFUTDINOVA, A.M.; ISACOVA, C.I.; COCEMASOV, A.I.; NIKA, D.L. Ultra-low thermal conductivity of Germanium nanowires. *Physics of the Solid State*. 2024, vol. 66(8), pp. 250 – 256. Springer Nature,
<https://doi.org/10.1134/S1063783424601127> (FI = 0.9)
- PRONIN, I.A.; PLUGIN, I.A.; KOLOSOV, D.A.; KARMANOV, A.A.; YAKUSHOVA, N.D.; VAREZHNIKOV, A.S.; KOMOLOV, A.S.; LAZNEVA, E.F.; KOROLEVA, A.V.; MOSHNIKOV, V.A.; KONDRATEV, V.M.; GLUKHOVA, O.E.; KOROTCENKOV, Gh.; SYSOEV, V.V. Sol-gel derived ZnO films as a gas sensor: Influence of UV processing versus a thermal annealing. *Sensors and Actuators A: Physical*. 2024, vol. 377, p. 115707. Elsevier,
<https://doi.org/10.1016/j.sna.2024.115707> (FI = 4.1)
- SIRKELI, V.P. Effect of substrate polarity on the performance characteristics of InGaN-based green light-emitting diodes. *Semiconductors*. 2024, vol. 58(12), pp. 928-935. Springer Nature,
<https://doi.org/10.1134/S1063782624602528> (FI = 0.6)
- SIRKELI, V.P.; YILMAZOGLU, O.; HAJO, A.S.; NEDEOGLO, N.D.; NEDEOGLO, D.D.; KUPPERS, F.; HARTNAGEL, H.L. High performance ZnSe-based metal–semiconductor–metal ultraviolet photodetectors with different schottky contacts, *Physics of the Solid State*, 2024, vol. 66(8), 257 – 264. Springer Nature,
<https://doi.org/10.1134/S1063783424601164> (FI = 0.9)

7. Teze ale conferințelor științifice

7.2. în lucrările conferințelor științifice internaționale din Republica Moldova

- COCEMASOV, A.I.; BRINZARI, V.I.; NIKA, D.L. Thermal transport suppression in indium oxide by rattling atoms. In: 10th International Conference on Materials Science and Condensed Matter Physics, October 1-4, 2024, Book of Abstracts, p. 50. Instrumentul Bibliometric Național,
https://ibn.idsi.md/ro/vizualizare_articol/217338
- ISAC-GUTSUL, T.; TUTOVAN, E.; NIKA, D.L. Study of azithromycin degradation in the UV/H₂O₂ system. In: 10th International Conference on Materials Science and Condensed Matter Physics, October 1-4, 2024, Book of Abstracts, p. 190. Instrumentul Bibliometric Național,
https://ibn.idsi.md/collection_view/3260
- ISACOVA, C.I.; COCEMASOV, A.I.; NIKA, D.L. Reduction of the lattice thermal conductivity in Si-based nanowires and nanotubes. In: 10th International Conference on Materials Science and Condensed Matter Physics, October 1-4, 2024, Book of Abstracts, p. 142. Instrumentul Bibliometric Național,
https://ibn.idsi.md/ro/vizualizare_articol/218952
- SIRKELI, V.P.; BORIS, I.B.; NIKA, D.L. Effect of AlGa_N interlayer on performance of InGa_N-based red light emitting devices. In: 10th International Conference on Materials Science and Condensed Matter Physics, October 1-4, 2024, Book of Abstracts, p. 140. Instrumentul Bibliometric Național,
https://ibn.idsi.md/vizualizare_articol/218950
- SIRKELI, V.; YILMAZOGLU, O.; HAJO, A.S.; NEDEOGLO, N.; NEDEOGLO, D.; PREU, S.; KUPPERS, F.; HARTNAGEL, H.L. High performance ZnSe-based ultraviolet photodetectors with Cr/Au, Ni/Au and hybrid Ag-nanowire contacts. In: NANO - 2024: "Quo Vadis – Ethics of the Scientific Research", Ed. 3, April 15-18, 2024, Book of abstracts, p. 31. Instrumentul Bibliometric Național,
https://ibn.idsi.md/ro/vizualizare_articol/203901

Coordonatorul subprogramului
de cercetare

NICA Denis
(numele, prenumele)

(semnătura)

Data: 30.01.2025

Componenta echipei de cercetare
INGINERIA MATERIALELOR NANOSTRUCTURATE FUNCȚIONALE
PE BAZA SI, SIGE, ZNO, INGAALN, SNO₂ ȘI IN₂O₃
 (denumirea subprogramului)

Codul subprogramului **011208**

Echipa subprogramului pentru 2024							
Nr	Nume, prenume	Anul nașterii	Titlul științific	Funcția	Norma de muncă	Data angajării	Data eliberării*
1.	NICA Denis	1979	dr.hab.	șef de laborator	1.00	02.01.2024	
2.	COCEMASOV Alexandr	1987	dr.	cercetător științific coordonator	1.00	02.01.2024	
3.	BORIS Iulia	1978	dr.	cercetator științific superior	1.00	02.01.2024	
4.	ISACOVA Calina	1983	dr.	cercetator științific superior	1.00	02.01.2024	
5.	GAIU Nicolae	1964		cercetator științific	1.00	02.01.2024	
6.	BRÎNZARI Vladimir	1954	dr.	cercetator științific coordonator	0.50	02.01.2024	
7.	KOROTCENKOV Ghenadii	1949	dr.hab.	cercetator științific principal	0.25	02.01.2024	
8.	IVANOV Mihail	1948	dr.	cercetator științific	0.25	02.01.2024	
9.	SIRKELI Vadim	1978	dr.	cercetător științific coordonator	0.50	02.01.2024	
10.	ISAC-GUȚUL Tatiana	1977	dr.	cercetător științific	0.50	02.01.2024	
11.	BELDIGA Maria	1984	dr.	cercetător științific	0.25	02.01.2024	
12.	Zincenco Nadejda	1982	dr.	cercetător științific superior	0.50	02.01.2024	
13.	ASCHEROV Artur	1982	dr.	cercetător științific	0.50	02.01.2024	
14.	CARAGACIAN Stanislav	1999		cercetător științific coordonator	0.25	02.01.2024	

Ponderea tinerilor (%) din numărul total al executorilor	21.4%
--	--------------

Directorul unității de cercetare

ȘIKIMAKA Olga
(numele, prenumele)

(semnătura)

Coordonatorul subprogramului
de cercetare

NICA Denis
(numele, prenumele)

(semnătura)

Data: 30.01.2025