

Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în subprogram în anul 2025

Ingineria materialelor nanostructurate funcționale pe baza Si, SiGe, ZnO, InGaAlN, SnO₂ și In₂O₃
(denumirea subprogramului)

Codul subprogramului 011208

Pentru anul 2025

În anul 2025 în cadrul subprogramului 011208 „*Ingineria materialelor nanostructurate funcționale pe baza Si, SiGe, ZnO, InGaAlN, SnO₂ și In₂O₃*”, au fost studiate teoretic proprietățile electronice și fononice ale oxizilor In₂O₃ cu defecte biatomice Pb-Cu, precum și proprietățile emițătoare ale LED-urilor roșii pe bază de InGaN.

A fost demonstrat, că formarea defectului Pb_b-Cu_i în rețeaua cristalină a In₂O₃ rezultă în modificarea substanțială a spectrelor electronice și fononice. Benzile electronice dispersive sunt formate în principal din orbitaliile hibridizate O-2p, Pb-6s și In-5s, iar benzile fără dispersie (cu localizarea puternică a electronilor) sunt dominate de orbitaliile Cu-3d. În spectrul energetic al fononilor apare un număr mare de ramuri fononice plate în intervalul de energii de aproximativ 2–10 meV, care sunt dominate de vibrațiile atomilor de impuritate Cu și Pb. Aceste vibrații sunt localizate în spațiu și joacă rolul centrelor de împrăștiere a fononilor acustici cu viteză de grup înaltă.

De asemenea am arătat, că interstraturile nanometrice din GaN, AlGaN sau InAlGaN, create la interfața regiunii active din In_{0.4}Ga_{0.6}N a dispozitivelor LED, influențează semnificativ diagramele de bandă și dependențele curent–tensiune ale acestora. Drept urmare, prin modificarea materialului interstraturilor, poate fi îmbunătățită eficiența LED-urilor roșii InGaN. Cea mai bună performanță este obținută pentru structura cu interstratul In_{0.08}Al_{0.35}Ga_{0.57}N. Acest LED emite lumină cu lungimea de undă de 632 nm, iar eficiența sa „*wall-plug*” este de 21,2%, fiind cu aproximativ 3% mai mare decât în structura de referință fără interstrat.

Pe baza rezultatelor științifice obținute în cadrul subprogramului respectiv, în anul 2025 au fost publicate **9 articole** în reviste științifice internaționale cu factor de impact ISI, **8 capitole** în monografiile internaționale și **1 articol** într-o revistă națională de categoria B.

For the year 2025

In 2025, within subprogram 011208 “*Engineering of functional nanostructured materials based on Si, SiGe, ZnO, InGaAlN, SnO₂, and In₂O₃*”, the electron and phonon properties of In₂O₃ oxides with Pb–Cu biatomic defects were theoretically investigated, as well as the emission properties of red InGaN-based LEDs.

It was demonstrated that the formation of the Pb_b-Cu_i defect in the In₂O₃ crystal lattice leads to substantial modifications of the electronic and phonon spectra. The dispersive electronic bands are formed mainly from hybridized O-2p, Pb-6s, and In-5s orbitals, while the non-dispersive bands (with strong electron localization) are dominated by Cu-3d orbitals. In the phonon energy spectrum, a large number of flat phonon branches appear in the energy range of approximately 2–10 meV, which are dominated by vibrations of the Cu and Pb impurity atoms. These vibrations are spatially localized and act as scattering centers for high group-velocity acoustic phonons.

We also showed that nanometer-thick interlayers of GaN, AlGa_xN, or InAlGa_xN, created at the interface of the In_{0.4}Ga_{0.6}N active region of LED devices, significantly influence their band diagrams and current–voltage characteristics. As a result, the efficiency of red InGaN LEDs can be improved by modifying the interlayer material. The best performance is achieved for the structure with an In_{0.08}Al_{0.35}Ga_{0.57}N interlayer. This LED emits light with a wavelength of 632 nm, and its wall-plug efficiency is 21.2%, which is approximately 3% higher than that of the reference structure without an interlayer.

Based on the scientific results obtained within the respective subprogram, in 2025 a total of **9 articles** were published in international scientific journals with an ISI impact factor, **8 chapters** in international monographs and **1 article** in a national journal of Category B.