

RECEȚIONAT

Agenția Națională pentru Cercetare  
și Dezvoltare \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_ 2021

AVIZAT

Secția AȘM \_\_\_\_\_

\_\_\_\_\_ 2021

## RAPORT ȘTIINȚIFIC ANUAL

privind implementarea proiectului din cadrul Programului de Stat (2020-2023)

MATERIALE NANOSTRUCTURATE AVANSATE  
PENTRU APLICAȚII TERMOELECTRICE ȘI SENZORI,  
cu cifrul 20.80009.5007.02

Prioritatea Strategică V. Competitivitate economică și tehnologii inovative

Conducătorul proiectului

\_\_\_\_\_ NICA Denis



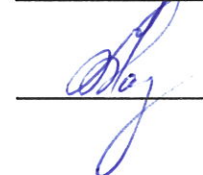
Rectorul Universității de Stat  
din Moldova

\_\_\_\_\_ ȘAROV Igor



Președintele Senatului USM

\_\_\_\_\_ ȘAROV Igor



Chișinău 2021

### 1. Scopul etapei anuale conform proiectului depus la concurs

Studierea proprietăților termoelectrice, electrofizice și fotoelectrice a materialelor nanostructurate în baza calcogenurilor de Sn, Fe și Bi și oxizilor In-Ga-Sn-O.

### 2. Obiectivele etapei anuale

1. Cercetarea experimentală a structurii cristaline ale peliculelor subțiri In-Sn-O:Ga (ITO:Ga), SnO<sub>2</sub>:MT (unde MT este metalul de tranziție, ex. Cu, Fe, Ni, Co) și Zn-Mg-O.
2. Studiarea teoretică a proprietăților electronice și fononice în peliculele In-Sn-O:Ga.
3. Studiarea teoretico-experimentală a particularităților transportului termic în peliculele ITO:Ga.
4. Obținerea materialelor cristaline a semiconductorilor SnS, SnS<sub>2</sub> și a structurilor de dispozitiv în baza lor.
5. Elaborarea unui model de dispozitiv microrăcitor, bazat pe straturi de izolatori topologici.
6. Elaborarea procedeele tehnologice de obținere a filmelor Bi-Sn pe suportul de sticlă și mică.
7. Elaborarea tehnologiilor de fabricare a materialelor compozite în baza compușilor CdTe, CdS prin asamblarea structurilor bidimensionale și tridimensionale pe matrice din materiale carbonice.

### 3. Acțiunile planificate pentru realizarea scopului și obiectivelor etapei anuale

1. Depunerea peliculelor în sistemul In-Sn-Ga-O (ITO:Ga) cu conținut divers de Ga, a peliculelor SnO<sub>2</sub>:TM (unde TM - metal de tranziție) și Zn<sub>1-x</sub>Mg<sub>x</sub>O ( $x = 0 \div 0.6$ ) prin metoda spray-pirolizei.
2. Caracterizarea structurală a peliculelor ITO:Ga și SnO<sub>2</sub>:TM, depuse prin metoda spray-pirolizei.
3. Caracterizarea structurală a peliculelor din sistemul ITO:Ga, obținute prin metoda pulverizării magnetronice.
4. Cercetarea proprietăților electronice și a transportului de căldură în peliculele ITO:Ga cu conținut diferit de Ga.
5. Efectuarea proceselor tehnologice de obținere a monocristalelor din materialele semiconductoare SnS, SnS<sub>2</sub>, prin cristalizare din faza de vapori.
6. Studiul efectului de răcire termică în straturi de izolatori topologici în baza Bi-Te și crearea în baza lor a microrăcitorului cu gradientul de temperatură  $\Delta T = 10 - 12$  °C.
7. Obținerea peliculelor de Bi-Sn pe suport de sticlă, mică și recristalizarea lor prin iradierea laser pentru modificarea axei cristalografice C<sub>3</sub>.
8. Fabricarea materialelor compozite în baza compușilor CdTe, CdS prin asamblarea structurilor bidimensionale și tridimensionale pe matrice din materiale carbonice.

### 4. Acțiunile realizate pentru atingerea scopului și obiectivelor etapei anuale

1. Prin metoda spray-pirolizei a fost efectuată depunerea peliculelor în sistemul In-Sn-Ga-O (ITO:Ga) cu conținut diferit de Ga, cât și a peliculelor SnO<sub>2</sub>:TM și Zn<sub>1-x</sub>Mg<sub>x</sub>O ( $x = 0 \div 0.6$ ) cu ajutorul metodei de spray-piroliză.
2. Prin metoda pulverizării magnetronice a fost efectuată depunerea peliculelor ITO:Ga cu

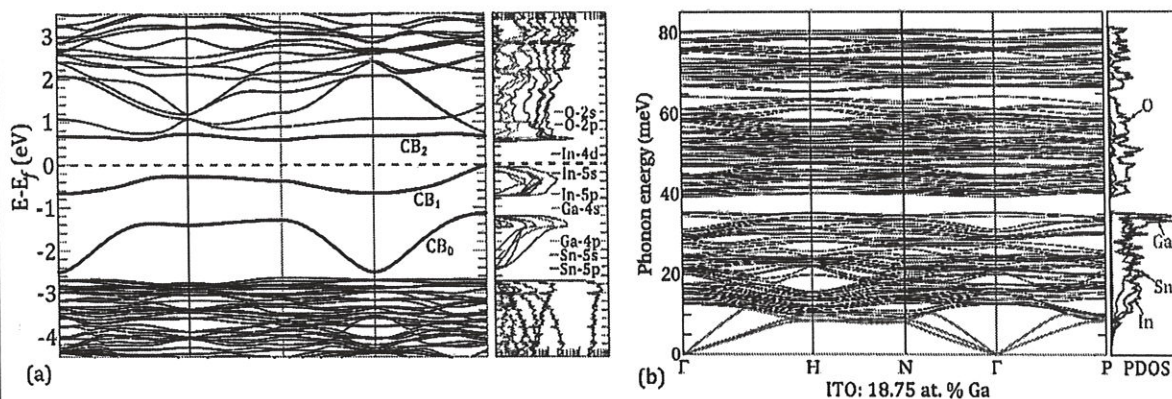
conținut de Ga în diapazonul 0-50 % at.

3. Prin metodele difracției X-Ray, microscopiei atomice de forță și a microscopiei electronice de scanare a fost cercetată structura rețelei cristaline și morfologia suprafeței peliculelor ITO:Ga, SnO<sub>2</sub>:MT și Zn<sub>1-x</sub>Mg<sub>x</sub>O ( $x = 0 \div 0.6$ ) depuse.
4. A fost dezvoltată teoria conductibilității termice de rețea în peliculele ITO:Ga nanogranulate și amorfă, utilizând teoria funcționalului densității stărilor pentru calculul stărilor electronice, constantele de interacțiune interatomară și ecuația cinetică linearizată Boltzman la modelarea conductibilității termice în aceste structuri.
5. Au fost efectuate procese tehnologice de obținere a monocristalelor din materialele semiconductoare SnS, SnS<sub>2</sub>, prin cristalizare din faza de vapori.
6. A fost studiat efectul de răcire termică în straturi de izolatori topologici în baza Bi-Te și a fost creat în baza lor un microrăcitor cu gradientul de temperatură  $\Delta T = 10^\circ \text{C}$ .
7. Au fost obținute filme de Bi-Sn pe suport de sticlă, mică și recristalizate prin iradierea laser cu lungimea de undă de 450 nm pentru modificarea axei cristalografice C<sub>3</sub>.
8. Au fost fabricate materiale compozite în baza compușilor CdTe, CdS prin asamblarea structurilor bidimensionale și tridimensionale pe matrice din materiale carbonice.

## 5. Rezultatele obținute

### 5.1. Proprietățile electronice și fononice ale oxizilor In-Sn-O: Ga

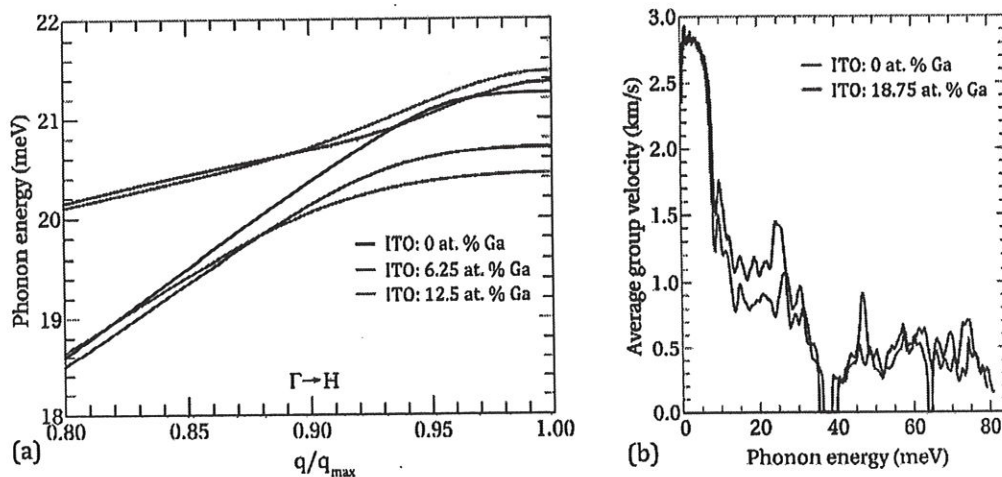
În cadrul teoriei funcționalului densității stărilor au fost cercetate *ab initio* proprietățile electronice și fononice ale oxidului In-Sn-O (ITO) cu diferite concentrații de Ga. Spectrele energetice și densitățile de stări ale electronilor și fononilor, calculate în ITO dopat cu ~ 6 % Ga, sunt prezentate în Figura 1.



**Figura 1.** Spectrele energetice și densitățile de stări ale electronilor (a) și fononilor (b) în ITO:Ga.

S-a stabilit, că formarea defectelor punctiforme de tip internod cu atomi de Ga demonstrează un comportament donor și duce la apariția a două noi subbenzi electronice CB<sub>1</sub> și CB<sub>2</sub> în comparație cu oxidul pur. Subbanda CB<sub>0</sub> este dominată de orbitalele O-2p și Sn-5s, în timp ce orbitalele O-2p, In-5p, In-5s și Ga-4s contribuie la formarea subbenzii CB<sub>1</sub>. La temperaturi joase CB<sub>2</sub> rămâne total neocupată, iar între CB<sub>1</sub> și CB<sub>2</sub> există o bandă interzisă îngustă de 0,6 eV. Prin urmare, ITO:Ga ar trebui să demonstreze o concentrație sporită de electroni și conductibilitate electronică deja la temperaturi moderate. Pe de altă parte, spectrul fononic la fel demonstrează particularități curioase și anume hibridizarea modelelor vibraționale ale atomilor de metal: In/Sn, In/Ga și Sn/Ga. Aceste mode hibride sunt însoțite de apariția multiplelor puncte în zona Brillouin cu caracter „anti-crossing”,

rezultând aplatizarea curbelor de dispersie și o scădere corespunzătoare a vitezei medii de grup a fononilor (vezi Figura 2). Acest efect devine mai pronunțat odată cu creșterea concentrației de Ga.



**Figura 2. (a)** Efectul „anti-crossing” între curbele fononice în ITO:Ga. **(b)** Viteza de grup medie a fononilor în ITO:Ga.

De asemenea au fost calculate și analizate sarcinile parțiale, funcțiile de localizare electronice și constantele interatomice de forță în ITO:Ga. În baza acestor rezultate am elaborat concluzia, că configurația cristalină a structurii ITO:Ga este favorabilă pentru existența efectului „rattling” datorită particularităților geometrice a celulei elementare și a interacțiunii complexului de atomi Sn-Ga. Atomii „rattling” joacă rolul centrelor de împrăștiere a fononilor.

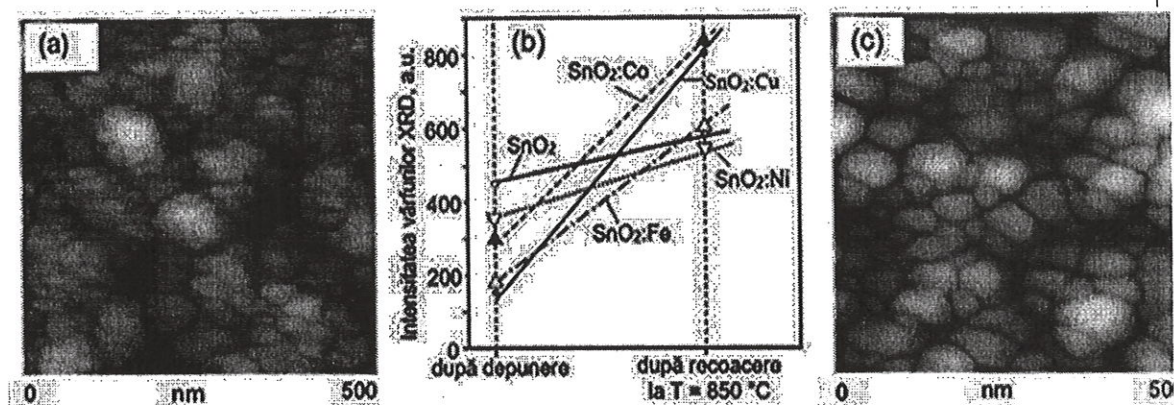
## 5.2. Structura cristalină a peliculelor subțiri In-Sn-Ga-O, obținute prin pulverizare magnetronică

A fost efectuată cercetarea particularităților structurale ale peliculelor subțiri din sistemul In-Sn-Ga-O, obținute prin pulverizare magnetronică. După componență peliculele date au fost analogice peliculelor obținute în etapa precedentă a proiectului prin metoda spray-pirolizei de temperatură joasă: concentrația Sn a fost de  $\sim 8-10\%$  at., iar concentrația Ga a variat în diapazonul  $0-50\%$  at. Însă peliculele, obținute în etapa dată a proiectului, au fost depuse la temperaturi de până la  $500\text{ }^{\circ}\text{C}$  pe substrat de safir. Substratul utilizat permite efectuarea coacerii lor la temperaturi înalte de  $\sim 1000\text{ }^{\circ}\text{C}$ , lucru planificat în etapa următoare (a treia) a proiectului. Difrakția Roentgen a stabilit starea cristalină a peliculelor, având concentrația Ga de până la  $20\%$  at. Dimensiunile corespunzătoare ale nanocristalitelor au variat de la  $10\text{ nm}$  până la  $6\text{ nm}$  odată cu creșterea concentrației de Ga. Microscopia atomică de forță a stabilit prezența aglomerațiilor de granule cu dimensiunea spațială caracteristică de  $\sim 30\text{ nm}$ . Poziția maximumurilor de bază ale difractogramelor peliculelor dopate cu Ga denotă o majorare a dimensiunilor celulei elementare a rețelei nanocristalitelui, lucru care se acordă cu prezicerile teoretice și indică o poziționare internodală a atomilor de Ga și Sn.

## 5.3. Structura cristalină a peliculelor subțiri $\text{SnO}_2$ :MT (MT=Cu, Fe, Ni, Co)

Doparea oxizilor metalici este o metodă importantă de îmbunătățire a parametrilor de exploatare a senzorilor și convertorilor termoelectrice. Dar la caracterizarea acestor materiale apar dificultăți legate de determinarea aportului fazei dispersate fin în proprietățile oxizilor metalici. În rezultatul analizei paralele a difracției Roentgen și a morfologiei

peliculelor, evaluate cu ajutorul microscopului atomic de forță (AFM) și a microscopului electronic de scanare (SEM), am arătat, că informația dată poate fi obținută analizând influența dopării asupra intensității maximumurilor XRD (vezi Figura 3). Am stabilit, că doparea oxizilor metalici independent de tipul adaosului dopant duce la micșorarea intensității maximumurilor XRD. Însă însuși valoarea micșorării intensității maximumurilor XRD depinde de tipul și concentrația impurității dopante, cât și de temperatura de depunere a peliculei. Cu cât temperatura de depunere este mai joasă, iar concentrația impurității utilizate este mai înaltă, cu atât este mai semnificativă căderea intensității. Este important de a menționa faptul, că în cazul tratării termice ( $T > 800 \text{ }^\circ\text{C}$ ) se observă efectul invers – la peliculele dopate de  $\text{SnO}_2$  intensitatea maximumurilor de difracție Roentgen se majorează mai puternic decât la peliculele nedopate. Creșterea maximală a intensității a fost observată la peliculele dopate cu Cu și Co, depuse la temperature joase ale pirolizei. Analizând imaginile SEM și AFM și datele XRD noi am concluzionat, că micșorarea intensității maximumurilor XRD, observată experimental, este consecință a apariției fazei dispersate fin (cu dimensiunea granulelor  $\leq 2 - 3 \text{ nm}$ ) în pelicula de  $\text{SnO}_2$  formată. Modificarea intensității maximumurilor a fost utilizată la caracterizarea materialului sub formă de parametru, care denotă prezența fazei dispersate fin ori chiar a fazei amorfe (ca în cazul sistemului ITO:Ga la o dopare  $> 20 \text{ \% at.}$ ).



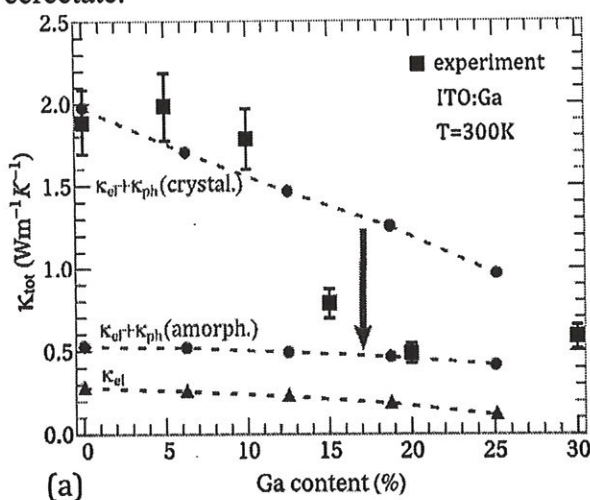
**Figura 3.** (a, c) Imaginea AFM a peliculelor dopate  $\text{SnO}_2:\text{Cu}$ , depuse prin metoda spray-pirolizei: (a) – până și (c) - după coacerea la temperatura de  $850 \text{ }^\circ\text{C}$ . (b) Influența coacerii asupra intensității maximumurilor XRD pentru peliculele de  $\text{SnO}_2$ , dopate cu metale de tranziție.

#### 5.4. Conductibilitatea termică a peliculelor subțiri In-Sn-O:Ga

Au fost efectuate cercetări a proprietăților termoconductibile ale peliculelor subțiri ITO, dopate cu Ga, obținute prin metoda spray-pirolizei. Măsurarea conductibilității termice a peliculelor a fost efectuată prin metoda reflexiei femtosecundale laser. Concentrația Sn în pelicule a fost de  $\sim 6 \text{ \%}$  (prin  $\%$  aici și în continuare se semnifică procente atomice). După cum am stabilit anterior [1-2], o astfel de concentrație a dopantului este optimală pentru obținerea peliculelor cu o valoare înaltă a coeficientului de calitate termoelectrică ZT. Pentru interpretarea datelor experimentale am dezvoltat modelul teoretic al conductibilității termice de rețea în astfel de pelicule. Constantele de forță ale interacțiunilor interatomare, care sunt necesare pentru calcularea modelor fononice, au fost determinate în cadrul teoriei funcționalului de densitate a stărilor. Conductibilitatea termică a fost obținută la linearizarea ecuației cinetice Boltzman în aproximația perioadei de relaxare. Au fost luate în calcul principalele perioade de împrăștiere a fononilor în structurile cristaline nanogranulate

(împrăștierea în procesele Umklapp și împrăștierea pe granule). Transportul fononic de difuzie, care este specific structurilor amorfe, a fost modelat cu ajutorul vitezei de difuzie a oscilațiilor rețelei (vezi Ec. 3 din [3]).

În Figura 4 este prezentată dependența conductibilității termice de concentrația Ga. Pătrățelele indică valorile măsurate ale conductibilității termice, iar curbele corespund rezultatelor teoretice, obținute pentru ITO:Ga cristalin și amorf. Conductibilitatea termică electronică este de câteva ori mai mică decât conductibilitatea termică de rețea în ITO:Ga nanogranulat și este comparabilă cu conductibilitatea termică de rețea în ITO:Ga amorf. Valorile experimentale ale conductibilității termice se află într-un acord perfect cu valorile teoretice, calculate pentru ITO:Ga granulat la concentrații ale Ga mai mici de 10 % și pentru ITO:Ga amorf la concentrații ale Ga mai mari de 20 %. Astfel putem concluziona, că micșorarea bruscă a conductibilității termice la majorarea concentrației Ga de la 10 % la 20 % este legată de modificarea caracterului transportului termic la amorfizarea rețelei cristaline a peliculelor cercetate.

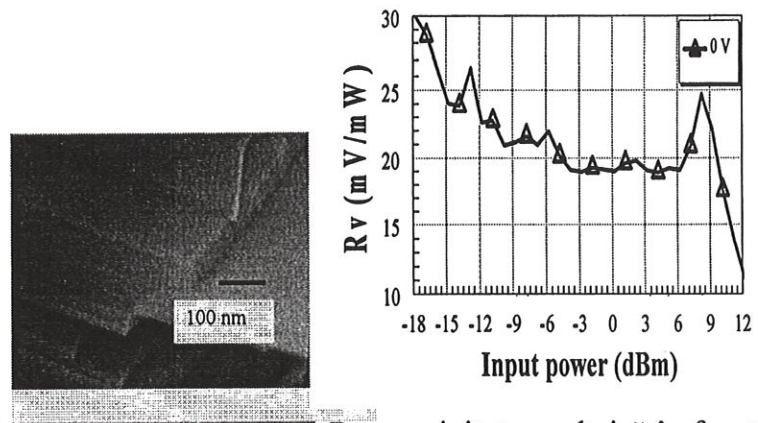


**Figura 4.** Dependența conductibilității termice de concentrația Ga în peliculele subțiri ITO:Ga.

*Rezultatele obținute demonstrează posibilități de inginerie a conductibilității termice prin modificarea concentrației de Ga dopant, iar valorile joase ale conductibilității termice pot fi de perspectivă în aplicațiile termoelectrice ale peliculelor subțiri ITO:Ga.*

### 5.5. Structura cristalină a peliculelor subțiri SnS.

Prin metoda transportului chimic din faza de vapori au fost inițial obținute monocristale de SnS și SnS<sub>2</sub>. Depunerea peliculelor de SnS (SnS<sub>2</sub>) s-a efectuat prin pulverizare magnetronică cu o configurare ce conține un magnetron RF, plasat central și o țintă din SnS (SnS<sub>2</sub>) cu diametrul de 50 mm, răcită cu apă. În procesul pulverizării RF temperatura substratului era menținută la T = 200 °C și la o presiune în camera de lucru de circa 7,4 mBar. Puterea de descărcare a magnetronului a fost de 80 W. Fluxul de argon în incintă a fost de 50 ml/min. În Figura 5(a) este prezentată imaginea SEM a filmelor de SnS, iar în Figura 5(b) este prezentată dependența responsivității voltaice în funcție de puterea la intrare pentru frecvența de 1 GHz.

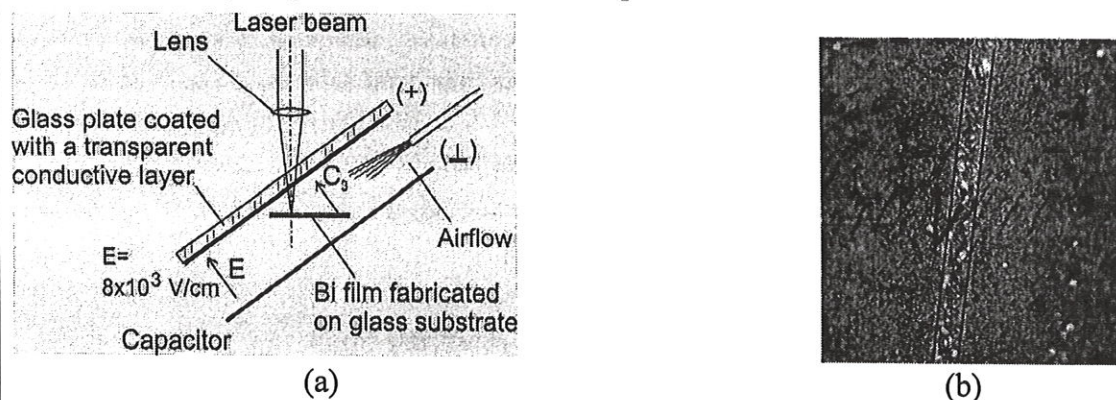


**Figura 5. (a)** Imaginea SEM a filmelor de SnS. **(b)** Responsivitatea voltaică în funcție de puterea la intrare la frecvența de 1 GHz.

În baza peliculelor de SnS cu grosimi nanometrice de  $\sim 10$  nm au fost confecționate structuri de dispozitive cu microunde și studiate proprietățile de detectare a microundelor, obținând la frecvența de 1 GHz o responsivitate de 30 mV/mW pentru 0 V tensiune aplicată la un nivel de putere la intrare de 16  $\mu$ W.

### 5.6. Tehnologia de recristalizare a peliculelor subțiri de Bi

A fost dezvoltată tehnologia de recristalizare a peliculelor subțiri de Bi cu scopul final de a obține orientarea necesară a axei cristalografice principale  $C_3$ . Metoda propusă se bazează pe brevetul nostru privind recristalizarea unui microfibr de bismut acoperit cu sticlă într-un câmp electric puternic (MD 1409 Y 2019.12.31). O altă arhitectură anisotropă a senzorului de flux de căldură, bazată pe tehnologia fabricării filmelor. Metoda constă în faptul, că un fascicul laser focalizat topește o mică zonă pe suprafața filmului de bismut policristalin prin deplasarea în interiorul unui condensator, format dintr-o placă de sticlă cu un strat conductiv semitransparent aplicat și o placă de cupru; în condensator se crează un câmp electric puternic,  $E = 8 \times 10^3$  V/cm. Porțiunea topită a filmului din interiorul condensatorului este cristalizată de un flux de aer cu direcția axei cristalografice principale  $C_3$  a filmului de-a lungul câmpului electric. Tehnologia de recristalizare propusă într-un câmp electric puternic este componenta principală și necesară în crearea convertoarelor de energie termoelectrică anisotropă pe baza unui film Bi monocristalin. În Figura 6 este prezentată schema metodei de recristalizare și fragmentul filmului de Bi după recristalizare.



**Figura 6. (a)** Schema tehnologică pentru realizarea metodei de creștere orientată a unui film monocristalin de bismut într-un câmp electric puternic. **(b)** Filmul de Bi, depus termic pe suport de mică cu grosimea de 25  $\mu$ m, după recristalizarea cu fascicul laser ( $\lambda = 450$  nm) cu viteza de deplasare de 0,1 cm/sec. Largimea benzii recristalizate este de 300  $\mu$ m.

### 5.7. Dispozitiv de microculere bazat pe straturi de izolatori topologici

A fost proiectat un răcitor termoelectric miniaturizat (sub formă de termocuplu) pe baza straturilor de izolatori topologici  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ ,  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  și  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$ , care face posibilă obținerea efectului de răcire cu  $2^\circ\text{C}$  pe o suprafață de  $0,01\text{ cm}^2$ . Materialele stratificate  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ ,  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  și  $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$  (n- și p-tip) au fost obținute utilizând metoda exfolierii mecanice (patent № MD1366Z2020.03.03). Prin metoda de segmentare a fost creat un dispozitiv format din 5 termocupluri, permițând obținerea unei diferențe de temperatură  $\Delta T = 6^\circ\text{C}$  la temperatura  $T = 300\text{ K}$  la aceleași suprafețe transversale. A fost demonstrat, că efectul de răcire poate fi majorat până la  $9^\circ\text{C}$  în termocuplul, în care ramura de *tip p* este formată din două straturi de  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$ , conectate în paralel, iar ramura de *tip n* este formată din folie de Bi - 16 % at. Sb cu aceeași suprafață transversală. Utilizarea dispozitivelor de răcire miniaturizate fabricate va crește funcționalitatea componentelor electronice moderne și va extinde limitele miniaturizării lor.

## 6. Diseminarea rezultatelor obținute în proiect în formă de publicații

### Lista lucrărilor științifice, științifico-metodice și didactice publicate în anul 2021 în cadrul proiectului din Programul de Stat:

#### Materiale nanostructurate avansate pentru aplicații termoelectrice și senzori cu cifrul 20.80009.5007.02

### 1. Monografii (recomandate spre editare de consiliul științific/senatul organizației din domeniile cercetării și inovării)

1.1. monografii internaționale

1.2. monografii naționale

### 2. Capitle în monografii naționale/internaționale

### 3. Editor culegere de articole, materiale ale conferințelor naționale/internaționale

1. Teko W. Napporn, Yaovi Holade (eds.) Metal oxide-based nanostructured electrocatalysts for fuel cells, electrolyzers, and metal-air batteries (Elsevier Metal Oxide Series edited by G. Korotcenkov), Elsevier, Cambridge, MA, 2021. ISBN: 9780128184967.

Disponibil: <https://www.elsevier.com/books/metal-oxide-based-nanostructured-electrocatalysts-for-fuel-cells-electrolyzers-and-metal-air-batteries/korotcenkov/978-0-12-818496-7>

2. Pandikumar, P. Rameshkumar (eds.) Metal Oxides in Nanocomposite-Based Electrochemical Sensors for Toxic Chemicals (Elsevier Metal Oxide Series edited by G. Korotcenkov), Elsevier, Cambridge, MA, 2021. ISBN: 9780128209394.

Disponibil: <https://www.elsevier.com/books/metal-oxides-in-nanocomposite-based-electrochemical-sensors-for-toxic-chemicals/pandikumar/978-0-12-820727-7>

3. Kamlendra Awasthi (ed.) Nanostructured Zinc Oxide (Elsevier Metal Oxide Series edited by G. Korotcenkov), Elsevier, Cambridge, MA, 2021. ISBN: 9780128189009.

Disponibil:

<https://www.elsevier.com/books/nanostructured-zinc-oxide/korotcenkov/978-0-12-818900-9>

4. Kunal Mondal (ed.) Metal-oxides for Biomedical and Biosensor Applications (Elsevier Metal Oxide Series edited by G. Korotcenkov), Elsevier, Cambridge, MA, 2021. ISBN: 9780128230336

Disponibil: <https://www.elsevier.com/books/metal-oxides-for-biomedical-and-biosensor->



[applications/korotcenkov/978-0-12-823033-6](https://www.elsevier.com/books/metal-oxide-based-nanofibers-and-their-applications/korotcenkov/978-0-12-823033-6)

5. V. Esposito, D. Marani (eds.) Metal oxide-based nanofibers and their applications (Elsevier Metal Oxide Series edited by G. Korotcenkov), Elsevier, Cambridge, MA, 2021. ISBN: 9780128206294.

Disponibil: <https://www.elsevier.com/books/metal-oxide-based-nanofibers-and-their-applications/esposito/978-0-12-820629-4>

#### 4. Articole în reviste științifice

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

1. COCEMASOV, A., BRINZARI, V., JEONG, D-G., KOROTCENKOV, G., VATAVU, S., LEE, J-S., NIKA, D. Thermal transport evolution due to nanostructural transformations in Ga-doped indium-tin-oxide thin films. In: *Nanomaterials* (MDPI). 2021, vol. 11(5), p. 1126, (1-14). ISSN: 2079-4991 (IF=5.08).  
Disponibil: <https://doi.org/10.3390/nano11051126>
2. KOROTCENKOV, G. Electrospun metal oxide nanofibers and their conductometric gas sensor application. Part 2: Gas sensors and their advantages and limitations. In: *Nanomaterials* (MDPI). 2021, vol. 11(6), p. 1555, (1-49). eISSN 2079-4991 (IF=5.08).  
Disponibil: <https://www.mdpi.com/2079-4991/11/6/1555>
3. KOROTCENKOV, G. Electrospun metal oxide nanofibers and their conductometric gas sensor application. Part 1: Nanofibers and features of their forming. In: *Nanomaterials* (MDPI). 2021, vol. 11(6), p. 1544, (1-27). eISSN 2079-4991 (IF=5.08).  
Disponibil: <https://www.mdpi.com/2079-4991/11/6/1544>
4. KOROTCENKOV, G., BRINZARI, V., NEHASIL, V. XPS study of Rh/ In<sub>2</sub>O<sub>3</sub> system. In: *Surfaces and Interfaces*. 2021, vol. 22, p. 100794, (1-5). ISSN: 2468-0230 (IF=4.84).  
Disponibil: <https://doi.org/10.1016/j.surfin.2020.100794>
5. KOROTCENKOV, G., NEHASIL, V. Ozone sensing by In<sub>2</sub>O<sub>3</sub> films modified with Rh: Dimension effect. In: *Sensors* (MDPI). 2021, vol. 21, p. 1886, (1-12). eISSN 1424-8220 (IF=3.58).  
Disponibil: <https://www.mdpi.com/1424-8220/21/5/1886>
6. ISACOVA, C., COCEMASOV, A., NIKA, D.L., FOMIN, V.M. Phonons and thermal transport in Si/SiO<sub>2</sub> multishell nanotubes: Atomistic study. In: *Applied Sciences*. 2021, vol. 11, p. 3419, (1-12). ISSN: 2076-3417 (IF=2.6).  
Disponibil: <https://doi.org/10.3390/app11083419>
7. MORARI, V., PYRTSAC, C., CURMEI, N., GRABCO, D., RUSU, E., URSAKI, V., TIGINYANU, I.M. Nanoindentation of ZnSnO/Si thin films prepared by aerosol spray pyrolysis. In: *Romanian Journal of Physics*, 2021, vol. 66, nr. 3-4, p. 603, (1-18). ISSN: 1221-146X.  
Disponibil: [https://rjp.nipne.ro/2021\\_66\\_3-4.html](https://rjp.nipne.ro/2021_66_3-4.html)
8. MORARI, V., RUSU, E.V., POSTOLACHE, V., URSAKI, V.V., TIGINYANU, I.M., ROGACHEV, A.V., SEMCHENKO, A.V. Injection photodiode based on an Al-p-Si/n-Zn<sub>0.85</sub>Mg<sub>0.15</sub>O/n-Zn<sub>0.65</sub>Mg<sub>0.35</sub>O-Ag structure. In: *Romanian Journal of Physics*, 2021, vol. 66, nr. 7-8, p. 609, (1-11). ISSN: 1221-146X.  
Disponibil: [https://rjp.nipne.ro/2021\\_66\\_7-8.html](https://rjp.nipne.ro/2021_66_7-8.html)

4.2. în alte reviste din străinătate recunoscute

4.3. în reviste din Registrul National al revistelor de profil, cu indicarea categoriei  
*Categoria B*

1. БОРИС, Ю., БРЫНЗАРЬ, В., ТАРАКАНОВА, Л., ИВАНОВ, М., КОРОТЧЕНКОВ, Г. Исследование пленок SnO<sub>2</sub>, легированных переходными металлами, методом Рентгеновской дифракции. In: *Studia Universitatis Moldaviae, Seria „Științe exacte și economice”*. Chișinău. 2021, nr. 2(142), p. 78-83. ISSN 1857-2073.  
Disponibil: <https://zenodo.org/record/5094804#.YYBs6GDP02w>
2. КОЧЕМАСОВ, А., БОРИС, Ю., ЗИНЧЕНКО, Н., НИКА, Д. Фононные свойства кремниевых нанослоев. In: *Studia Universitatis Moldaviae, Seria „Științe exacte și economice”*. Chișinău. 2021, nr. 2(142), p. 84-91. ISSN 1857-2073.  
Disponibil: <https://zenodo.org/record/5094816#.YYBvMGDP02w>
3. ISAC-GUȚUL, T., TUTOVAN, E. Studiul cineticii oxidării unor sulfonamide cu ionii permanganat în mediu bazic. In: *Studia Universitatis Moldaviae, Seria „Științe Reale și ale Naturii”*. Chișinău. 2021, nr. 1(141), p. 172-180. ISSN 1814-3237.  
Disponibil: [https://zenodo.org/record/4980967#.YYD\\_ENaXxIU](https://zenodo.org/record/4980967#.YYD_ENaXxIU)
4. ISAC-GUȚUL, T., TUTOVAN, E., NICA, D. Degradarea antibioticului ftalilsulfatazol în sistemul foto-Fenton în soluții apoase. In: *Studia Universitatis Moldaviae, Seria „Științe Reale și ale Naturii”*. Chișinău. 2021, nr. 6(146), p. 158-165. ISSN: 1814-3237.
5. ТУТОВАН, Е., ИСАК-ГУЦУЛ, Т. Изучение адсорбции и кинетика адсорбции метиленового синего из водного раствора на трепеле. In: *Studia Universitatis Moldaviae, Seria „Științe Reale și ale Naturii”*. Chișinău. 2021, nr. 6(146), p. 149-157. ISSN: 1814-3237.

4.4. în alte reviste naționale

**5. Articole în culegeri științifice naționale/internaționale**

5.1. culegeri de lucrări științifice editate peste hotare

5.2 culegeri de lucrări științifice editate în Republica Moldova

**6. Articole în materiale ale conferințelor științifice**

6.1. în lucrările conferințelor științifice internaționale (peste hotare)

6.2. în lucrările conferințelor științifice internaționale (Republica Moldova)

6.3. în lucrările conferințelor științifice naționale cu participare internațională

6.4. în lucrările conferințelor științifice naționale

**7. Teze ale conferințelor științifice**

7.1. în lucrările conferințelor științifice internaționale (peste hotare)

1. MORARI, V., URSAKI, V., RUSU, E., TIGHINEANU, I. UV photodetector based on Zn<sub>1-x</sub>Mg<sub>x</sub>O Thin Films. In: *Applied Nanotechnology and Nanoscience, International Conference – ANNIC 2021*, France, Paris, 24-26 March 2021, Online, Abstract ID: 106, Book of Abstracts, pp. 191-192, (2021).

Disponibil: <https://premc.org/conferences/annic-nanotechnology-nanoscience>

2. KONOPKO, L., NIKOLAEVA, A., HUBER, T. Quantum oscillations in topological insulator microwires contacted with superconducting leads. In: *Applied Nanotechnology and Nanoscience International Conference ANNIC 2021*, France, Paris, 24-26 March 2021, Online, Abstract ID: 64, BOOK OF ABSTRACTS, p. 171, (2021).

Disponibil: <https://premc.org/conferences/annic-nanotechnology-nanoscience>

3. NIKOLAEVA, A., KONOPKO, L., HUBER, T., POPOV, I., BOTNARI, O. Quantum size effect and surface state of “topological insulator” in Bi<sub>1-x</sub>Sb<sub>x</sub> wires near the gapless

state. In: *Applied Nanotechnology and Nanoscience International Conference ANNIC 2021*, France, Paris, 24-26 March, 2021, Online, Abstract ID: 142, BOOK OF ABSTRACTS, pp. 174-175, (2021).

Disponibil: <https://premc.org/conferences/annic-nanotechnology-nanoscience>

## 7.2. în lucrările conferințelor științifice internaționale (Republica Moldova)

1. MORARI, V. Afinitatea electronilor și optimizarea benzii interzise a filmelor de  $Zn_{1-x}Mg_xO$ . In: *Technical-Scientific Conference of Undergraduate, Master and Phd Students*. UTM, Chisinau, 23-25 March, vol. I, pp. 319-322, (2021). ISBN 978-9975-45-700-2.

Disponibil: <https://utm.md/wp-content/uploads/2021/06/Culegere-Vol-I-Conf-tinerilor-UTM-2021.pdf>

2. MORARI, V., RUSU, E., URSAKI, V., TIGINYANU, I. Responsivity and detectivity of  $Zn_{0.8}Mg_{0.2}O/p$ -Si prepared by spin coating and aerosol deposition method. In: *The 12th International Conference on Intrinsic Josephson Effect and Horizons of Superconducting Spintronics (SPINTECH-NANO-2021)*, 22-25 September, Chisinau, Republic of Moldova, (2021). Conference Abstract Book, p. 66.

Disponibil: <https://nanotech.md/en/page/89/spintech-nano-2021>

3. NIKOLAEVA, A., KONOPKO, L., HUBER, T., GERGISHAN, I., PARA, Gh. Topological insulator micro - wires and microlayers as potential thermoelectric material for microelectronics. In: *The 12th International Conference on Intrinsic Josephson Effect and Horizons of Superconducting Spintronics (SPINTECH-NANO-2021)*, 22-25 September, Chisinau, Republic of Moldova, (2021). Conference Abstract Book, p. 78.

Disponibil: <https://nanotech.md/en/page/89/spintech-nano-2021>

4. KONOPKO, L., NIKOLAEVA, A., HUBER, T., ROGACKI, K. Quantum oscillations in microwires of topological insulator contacted with superconducting leads. In: *The 12th International Conference on Intrinsic Josephson Effect and Horizons of Superconducting Spintronics (SPINTECH-NANO-2021)*, 22-25 September, Chisinau, Republic of Moldova, (2021). Conference Abstract Book, p. 74. Disponibil:

<https://nanotech.md/en/page/89/spintech-nano-2021>

5. MORARI, V., RUSU, E.V., URSAKI, V.V., NIELSCH, K., TIGINYANU, I.M. Aerosol spray deposited wurtzite ZnMgO alloy films with MgO nanocrystalline inclusions. In: *5th International Conference on Nanotechnologies and Biomedical Engineering, ICNBME-2021*, November 3-5, 2021, Chisinau, Moldova. Book of abstracts, p. 62.

Disponibil: <https://icnbme.sibm.md/>

## 7.3. în lucrările conferințelor științifice naționale cu participare internațională

1. БРЫНЗАРЬ, В., БОРИС, Ю., ИВАНОВ, М., ДАМАСКИН, И. Состояния хемосорбированного кислорода на поверхности оксида индия в присутствии озона. In: *Științe ale Naturii și Exacte: materialele șt. a Conf. științifică națională cu participare internațională „Integrare prin Cercetare și Inovare”*, dedicată aniversării a 75-a a Universității de Stat din Moldova, 10-11 noiembrie, 2021. Chișinău, USM, 2021, pp. 183-185. ISBN 948-9975-152-48.8.

Disponibil: [https://cercetare.usm.md/?page\\_id=1633&lang=en](https://cercetare.usm.md/?page_id=1633&lang=en)

2. КЛЮКАНОВ, А., НИКА, Д., ВАТАВУ, С. Нелинейное уравнение Шредингера статистической физики. In: *Științe ale Naturii și Exacte: materialele șt. a Conf. științifică națională cu participare internațională „Integrare prin Cercetare și Inovare”*,

*dedicată aniversării a 75-a a Universității de Stat din Moldova*, 10-11 noiembrie, 2021. Chișinău, USM, 2021, pp. 207-209. ISBN 948-9975-152-48.8.

Disponibil: [https://cercetare.usm.md/?page\\_id=1633&lang=en](https://cercetare.usm.md/?page_id=1633&lang=en)

3. КОРОТЧЕНКОВ, Г., ИВАНОВ, М. Поверхностные и газочувствительные характеристики In<sub>2</sub>O<sub>3</sub> и SnO<sub>2</sub> пленок, модифицированных родием. In: *Științe ale Naturii și Exacte: materialele șt. a Conf. științifică națională cu participare internațională „Integrare prin Cercetare și Inovare”*, dedicată aniversării a 75-a a Universității de Stat din Moldova, 10-11 noiembrie, 2021. Chișinău, USM, 2021, pp. 210-213. ISBN 948-9975-152-48.8  
Disponibil: [https://cercetare.usm.md/?page\\_id=1633&lang=en](https://cercetare.usm.md/?page_id=1633&lang=en)
4. COCEMASOV, A., BRINZARI, V., NIKA, D. Phonon transport in gallium-doped indium tin oxide. In: *Științe ale Naturii și Exacte: materialele șt. a Conf. științifică națională cu participare internațională „Integrare prin Cercetare și Inovare”*, dedicată aniversării a 75-a a Universității de Stat din Moldova, 10-11 noiembrie, 2021. Chișinău, USM, 2021, pp. 186-189. ISBN 948-9975-152-48.8.  
Disponibil: [https://cercetare.usm.md/?page\\_id=1633&lang=en](https://cercetare.usm.md/?page_id=1633&lang=en)
5. ИСАКОВА, К., КОЧЕМАСОВ, А., НИКА, Д. Фононная инженерия в нанонитях и нанотрубках на основе кремния. In: *Științe ale Naturii și Exacte: materialele șt. a Conf. științifică națională cu participare internațională „Integrare prin Cercetare și Inovare”*, dedicată aniversării a 75-a a Universității de Stat din Moldova, 10-11 noiembrie, 2021. Chișinău, USM, 2021, pp. 194-196. ISBN 948-9975-152-48.8.  
Disponibil: [https://cercetare.usm.md/?page\\_id=1633&lang=en](https://cercetare.usm.md/?page_id=1633&lang=en)
6. ТУТОВАН, Е., ИСАК-ГУЦУЛ, Т. Адсорбция метиленового синего на трепеле. In: *Științe ale Naturii și Exacte: materialele șt. a Conf. științifică națională cu participare internațională „Integrare prin Cercetare și Inovare”*, dedicată aniversării a 75-a a Universității de Stat din Moldova, 10-11 noiembrie, 2021. Chișinău, USM, 2021, pp. 179-182. ISBN 948-9975-152-48.8.  
Disponibil: [https://cercetare.usm.md/?page\\_id=1633&lang=en](https://cercetare.usm.md/?page_id=1633&lang=en)
7. SUMAN, V., RUSU, E., ZALAMAI, V., URSACHI, V., GHIMPU, L. Proprietățile optice ale filmelor ITO:Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, obținute prin pulverizare magnetron. In: *Științe ale Naturii și Exacte: materialele șt. a Conf. științifică națională cu participare internațională „Integrare prin Cercetare și Inovare”*, dedicată aniversării a 75-a a Universității de Stat din Moldova, 10-11 noiembrie, 2021. Chișinău, USM, 2021, pp. 199-201. ISBN 948-9975-152-48.8.  
Disponibil: [https://cercetare.usm.md/?page\\_id=1633&lang=en](https://cercetare.usm.md/?page_id=1633&lang=en)
8. НИКОЛАЕВА, А., КОНОПКО, Л., ХУБЕР, Т., ГЕРГИШАН, И., ПАРА, Г., НИКА, Д. Миниатюрное охлаждающее устройство на базе монокристаллических слоев топологических изоляторов Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>. In: *Științe ale Naturii și Exacte: materialele șt. a Conf. științifică națională cu participare internațională „Integrare prin Cercetare și Inovare”*, dedicată aniversării a 75-a a Universității de Stat din Moldova, 10-11 noiembrie, 2021. Chișinău, USM, 2021, pp. 202-203. ISBN 948-9975-152-48.8.  
Disponibil: [https://cercetare.usm.md/?page\\_id=1633&lang=en](https://cercetare.usm.md/?page_id=1633&lang=en)
9. КОНОПКО, Л., НИКОЛАЕВА, А., ХУБЕР, Т., КОБЫЛЯНСКАЯ, А., НИКА, Д. Анизотропный термоэлемент на основе монокристаллических проволок и пленок висмута. In: *Științe ale Naturii și Exacte: materialele șt. a Conf. științifică națională cu participare internațională „Integrare prin Cercetare și Inovare”*, dedicată aniversării a

75-a a Universității de Stat din Moldova, 10-11 noiembrie, 2021. Chișinău, USM, 2021, pp. 197-198. ISBN 948-9975-152-48.8.

Disponibil: [https://cercetare.usm.md/?page\\_id=1633&lang=en](https://cercetare.usm.md/?page_id=1633&lang=en)

7.4. în lucrările conferințelor științifice naționale

**8. Alte lucrări științifice** (recomandate spre editare de o instituție acreditată în domeniu)

8.1. cărți (cu caracter informativ)

8.2. enciclopedii, dicționare

8.3. atlase, hărți, albume, cataloage, tabele etc. (ca produse ale cercetării științifice)

**9. Brevete de invenții și alte obiecte de proprietate intelectuală, materiale la saloanele de invenții**

1. KONOPKO Leonid, NIKOLAEVA Albina, BODIUL Pavel, PARA Gheorghe, BOTNARI Oxana. *Material termoelectric pe baza de bismut*. Hotărârea nr. 9749 din 1803.2021.
2. KONOPKO Leonid, NIKOLAEVA Albina, BODIUL Pavel, PARA Gheorghe. *Material termoelectric anizotrop pe baza de bismut*. Hotărârea nr. 9910 din 21.10.2021.
3. KONOPKO Leonid, NIKOLAEVA Albina, BODIUL Pavel, PARA Gheorghe, SLOBODENIUC Constantin. *Metoda de obținere a materialelor termoelectrice*. Hotărârea nr. 9941 din 29.11.2021.

**10. Lucrări științifico-metodice și didactice**

10.1. manuale pentru învățământul preuniversitar (aprobate de ministerul de resort)

10.2. manuale pentru învățământul universitar (aprobate de consiliul științific /senatul instituției)

10.3. alte lucrări științifico-metodice și didactice

**7. Impactul științific, social și/sau economic al rezultatelor științifice obținute în cadrul proiectului**

Impactul științific fundamental al rezultatelor obținute este legat de obținerea cunoștințelor fundamentale noi despre procesele electronice, fononice și termice, care se petrec în materialele nanostructurate, obținute la realizarea proiectului: peliculele subțiri ITO:Ga, SnO<sub>2</sub>:MT (MT= Cu, Fe, Ni, Co), SnS, SnS<sub>2</sub>, Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>, Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> și Bi<sub>1-x</sub>Sb<sub>x</sub>. În cadrul proiectului au fost stabilite posibilități de optimizare a proprietăților electronice, termice și termoelectrice ale materialelor cercetate și au fost elaborate prototipuri ale dispozitivelor cu microunde și dispozitivelor termoelectrice miniaturizate, care reprezintă impactul aplicativ al proiectului. Aplicarea practică a rezultatelor obținute ar putea contribui atât îmbunătățirii parametrilor de lucru ai convertorilor termoelectrice existenți, cât și apariției unei clase noi de convertori termoelectrice în baza peliculelor subțiri In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>:Sn, Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>, Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> și/sau Bi<sub>1-x</sub>Sb<sub>x</sub>. Acesta ar fi posibilul impact economic al proiectului. Rezultatele obținute vor fi de asemenea utilizate la actualizarea cursurilor, duse de participanții la proiect 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.

**8. Infrastructura de cercetare utilizată în cadrul proiectului**

În realizarea proiectului a fost utilizată infrastructura de cercetare a Universității de Stat

din Moldova (USM), a Institutului de Inginerie Electronică și Nanotehnologii “D.Ghițu” (IEN), a Centrului Național de Studiu și Testare a Materialelor (CNSTM) al Universității Tehnice a Moldovei și a Institutului de Știință și Tehnologie (IST) „Gwanju” (Corea de Sud):

**USM:**

- Instalațiile experimentale de depunere a peliculelor subțiri prin metodele de spray-piroliză și pulverizare magnetronică;
- Difractometrul de raze X – Empyrean (Malvern Panalytical)
- Microscopul Atomic de Forță – XE-7 (Park System).

**IEN:**

- Echipamente tehnologice de creștere a cristalelor prin metoda Bridgman;
- Echipamente tehnologice de transport chimic din faza de vapori, dotate cu dispozitive de reglare și menținere cu precizie înaltă a temperaturii de tip VRT-3;
- Instalația de depunere a filmelor prin metoda magnetron RF de tip „Tectra”;
- Instalația de depunere a filmelor prin metoda vaporizării termice de tip VUP-5M;
- Instalații industriale de întindere a firelor cu înveliș din sticlă de tip ITMF-3 (firma „Microfir Tehnologii Industriale Ltd”);
- Instalația pentru studierea efectului Peltier în probe nanostructurate de semiconductori și semimetale;
- Instalația pentru studierea rezistenței, puterii termoelectrice și a diagramelor de rotație într-un câmp magnetic constant de 0,4 T în probe de semiconductori și semimetale în intervalul de temperaturi 300 - 78 K.

**CNSTM:**

- Microscopul electronic de tip Zeiss Ultraplus SEM;
- Analizatorul EDX.

**IST:**

- Microscopul electronic de scanare (Hitachi S-4700);
- Instalația experimentală de măsurare a conductibilității termice prin metoda reflecției termice femtosecundale laser.

9. Colaborare la nivel național în cadrul implementării proiectului

Au fost efectuate colaborări științifice cu următoarele echipe de cercetători:

- echipa de cercetători condusă de dr. S. Vataavu (USM) (efectuarea analizei AFM și XRD a peliculelor subțiri ITO:Ga);
- echipa de cercetători de la Centrul Național pentru Studiul și Testarea Materialelor (UTM) (efectuarea analizei SEM și EDX a materialelor nanostructurate în baza SnS, SnS<sub>2</sub>, Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>, In-Ga-Sn-O, Zn-Mg-O).

10. Colaborare la nivel internațional în cadrul implementării proiectului

Au fost efectuate colaborări științifice cu următoarele echipe de cercetători:

- echipa de cercetători condusă de Prof. A.A. Balandin de la Universitatea din California –

- Riverside (SUA) (cercetări comune a proprietăților fononice în nanostructuri);
- echipa de cercetători de la Departamentul Fizica și Știința Fonică al Institutului de Științe și Tehnologii „Gwangju” (Corea de Sud);
  - echipa de cercetători de la Institutul de cercetare a materialelor solide Leibniz (IFW), Dresden, Germania: doctorandul Morari Vadim în cadrul Bursei DAAD a efectuat caracterizări ale materialelor oxidice și semiconductoare prin metodele SEM, EDX și XRD;
  - echipa de cercetători de la Institute of Low Temperatures and Structural Research, PAS, Wroclaw 50950, Poland. (Prof. K. Rogacki): efectuarea studiilor complexe privind structurile de dimensionalitate redusă în baza materialelor Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> și BiSb;
  - echipa de cercetători condusă de Prof. T.E. Huber de la Universitatea „Howard” (SUA) (cercetări comune);
  - echipa de cercetători condusă de Prof. A. Garcia-Hernandes de la Institutul de Astrofizica, Insulele Canaria (Spania) (pregătirea proiectului comun „Carbon molecular nanostructures in space” pentru concursul „COST Action”).

#### 11. Dificultățile în realizarea proiectului

Principalele dificultăți în realizarea proiectului au fost legate de imposibilitatea procurării în momentul oportun a reactivelor chimice necesare, cât și de restricțiile privind accesul la utilajul experimental, care s-au introdus periodic în legătură cu pandemia de COVID-2019.

#### 12. Diseminarea rezultatelor obținute în proiect în formă de prezentări la foruri științifice (comunicări, postere – pentru cazurile când **nu au fost publicate** în materialele conferințelor, reflectate în p. 6)

- Manifestări științifice internaționale (în străinătate)
- Manifestări științifice internaționale (în Republica Moldova)

#### 13. Aprecieri și recunoașterea rezultatelor obținute în proiect (premiu, medalii, titluri, alte aprecieri)

1. KOROTCENKOV, GHENADII, dr. hab.; Medalie de Aur; Salonul de carte organizat sub egida EUROINVENT 2021, 20-22 Mai 2021, Iași, România;
2. NIKOLAEVA, ALBINA, dr. hab.; Medalie de Aur; EUROINVENT 2021; 13 Edition European Exhibition of Creativity and Innovation, 20-22 Mai 2021, Iași, România;
3. KONOPKO, LEONID, dr.; Medalie de Argint; EUROINVENT 2021; 13 Edition European Exhibition of Creativity and Innovation, 20-22 Mai 2021, Iași, România;
4. MORARI, VADIM; Medalie de Argint; EUROINVENT 2021; 13 Edition European Exhibition of Creativity and Innovation, 20-22 Mai 2021, Iași, România;
5. NIKOLAEVA, ALBINA, dr. hab.; Medalie de Aur; INVENTICA 2021, XXV-th International Exhibition of Inventics, 23-25 Iunie, 2021, Iasi, Romania;
6. MORARI, VADIM; Medalie de Argint; INVENTICA 2021, XXV-th International Exhibition of Inventics, 23-25 Iunie, 2021, Iasi, Romania.
7. COJOCARU, VICTOR, dr.; Medalie de Aur; INFOINVENT 2021, Expoziția Internațională Specializată, Ediția a XVII-a, 17-20 noiembrie, 2021, Chisinau, Moldova;
8. KONOPKO, LEONID, dr.; Medalie de Argint; INFOINVENT 2021, Expoziția

Internațională Specializată, Ediția a XVII-a, 17-20 noiembrie, 2021, Chisinău, Moldova;

9. NIKOLAEVA, ALBINA, dr. hab.; Medalie de Bronz; INFOINVENT 2021, Expoziția Internațională Specializată, Ediția a XVII-a, 17-20 noiembrie, 2021, Chisinău, Moldova;
10. MORARI, VADIM; Medalie de Bronz; INFOINVENT 2021, Expoziția Internațională Specializată, Ediția a XVII-a, 17-20 noiembrie, 2021, Chisinău, Moldova;
11. COJOCARU, VICTOR, dr; Mențiunea „Produs inovativ de succes”; INFOINVENT 2021, Expoziția Internațională Specializată, Ediția a XVII-a, 17-20 noiembrie, 2021, Chisinău, Moldova.

14. Promovarea rezultatelor cercetărilor obținute **în proiect** în mass-media:

- Emisiuni radio/TV de popularizare a științei
- Articole de popularizare a științei

15. Teze de doctorat / postdoctorat susținute și confirmate în anul 2021 de membrii echipei proiectului

16. Materializarea rezultatelor obținute **în proiect**

17. Informație suplimentară referitor la activitățile membrilor echipei în anul 2021

- Membru/președinte al comitetului organizatoric/științific, al comisiilor, consiliilor științifice de susținere a tezelor
  - Nica, Denis / 2021 International Conference on Applied Physics and Energy Development (APED 2021), Xi'an, China / 7-8 Noiembrie / membru al Comitetului de Program;
  - Nica, Denis / 22<sup>nd</sup> International Scientific-Practical Conference „Modern Information And Electronic Technologies” (MIET-2021), Odesa, Ukraine / 24-28 Mai / membru al Comitetului de Program;
  - Nica, Denis / 4<sup>th</sup> International Conference on Materials Physics and Materials Science, Dubai, UAE / 28-29 Decembrie / membru al Comitetului Organizatoric;
  - Rusu, Emil / Consiliul Științific Specializat D 134.01-21-33 din cadrul Institutului de Fizică Aplicată din 21 septembrie 2021 în cadrul căruia a fost susținută teza de doctor în științe fizice”*Proprietățile optice și fotoelectrice ale nanocompozitelor din sulfură de galiu/seleniură de galiu-oxid propriu*” (autor – V. Sprîncean) / 21 septembrie 2021 / membru al Consiliului Științific Specializat.
  - Korotcenkov, Ghenadii / International Conference on Control Sensors and Sensor Technology, Tokyo, Japan / January 07-08, 2021 / Membru al Comitetului de Program / <https://waste.org/control-sensors-and-sensor-technology-conference-in-january-2021-in-tokyo>
  - Korotcenkov, Ghenadii / International Conference on Control Sensors and Sensor Technology (ICCSST 2021), Dubai, United Arab Emirates / March 22 - 23, 2021 / Membru al Comitetului Științific / <https://waset.org/control-sensors-and-sensor-technology-conference-in-march-2021-in-dubai>



- Korotcenkov, Ghenadii / 6th International Conference on Computer and Digital Manufacturing (ICCDM 2021), Singapore / April 23 - 26, 2021 / Membru al Comitetului de Conducere / <http://www.icdm.net/contact.html>
  - Korotcenkov, Ghenadii / 12th International Conference on Material and Manufacturing Technology (ICMMT 2021), Singapore / April 23 - 26, 2021 / Membru al Comitetului de Conducere / <http://icmmt.org/index.html>
  - Korotcenkov, Ghenadii / 9th International Conference on Metallurgy Technology and Materials (ICMTM 2021), Zhengzhou, China / 15 - 16, May, 2021 / Membru al Comitetului de Program / <http://icmtm.org/member.html>
  - Korotcenkov, Ghenadii / 4th Annual International Conference on Energy Development and Environmental Protection (EDEP 2021), Guiyang, Guizhou, China / Jul 23 - 25, 2021 / Membru al Comitetului Editorial. <http://www.edep2021.org/?op=committee>
  - Korotcenkov, Ghenadii / International Conference on Ocean, Atmosphere and Environmental Science OAES 2021, Guiyang, Guizhou, China / July 23 - 25, 2021 / Membru al Comitetului de Program <http://www.oaes2021.org/?op=committee>
  - Korotcenkov, Ghenadii / International Conference on Materials Science and Nanomaterials, Valencia, Spain / October 11 - 13, 2021 / Membru al Comitetului Științific. (<https://www.albedomeetings.com/materialsmeet/committee.php>)
  - Korotcenkov, Ghenadii / International Conference on Material Science Word Forum (MSWF 2021), Edinburgh, Scotland / November 04-06, 2021 / Membru al Comitetului Științific. <https://www.continuumforums.com/materials-science/committee.php>
- Redactor / membru al colegiilor de redacție al revistelor naționale / internaționale
- Nica, Denis / Applied Sciences (factor de impact (FI) = 2,679) / membru al Colegiului de Redacție;
  - Nica, Denis / Applied Physics Letters, (FI = 3,791) / recenzent oficial;
  - Nica, Denis / Physical Review Letters (FI = 8,38) / recenzent oficial;
  - Korotcenkov, Ghenadii / Sensors, Switzerland (FI=3.6) / membru al Colegiului de Redacție;
  - Korotcenkov, Ghenadii / Universal Journal of Lasers, Optics, Photonics and Sensors (UJLOPS) / membru al Colegiului de Redacție;
  - Korotcenkov, Ghenadii / Nanomaterials (FIF=5.1) / membru al Colegiului de Redacție;
  - Korotcenkov, Ghenadii / Current Chinese Chemistry / membru al Colegiului de Redacție;
  - Korotcenkov, Ghenadii / Surface Engineering and Applied Electrochemistry (FI=0.2) / membru al Colegiului de Redacție;
  - Brînzari, Vladimir / Journal Applied Surface Science Advances / Advisory Editorial Board member;
  - Nica, Denis / Studia Universitatis Moldaviae, Seria „Științe exacte” / redactor-șef;
  - Nica, Denis / Moldavian Journal of Physical Sciences / membru al Colegiului de Redacție;
  - Nica, Denis / Электронная обработка материалов / recenzent oficial;
  - Brînzari, Vladimir / Studia Universitatis Moldaviae, Seria „Științe exacte” / membru

al Colegiului de Redacție;

- Korotcenkov, Ghenadii / Studia Universitatis Moldaviae, Seria „Științe exacte” / membru al Colegiului de Redacție
- Rusu, Emil / Moldavian Journal of Physical Sciences / membru al Colegiului de Redacție.

#### 18. Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în proiect

În cadrul etapei a doua a proiectului **20.80009.5007.02** „*Materiale nanostructurate avansate pentru aplicații termoelectrice și senzori*” a fost continuată cercetarea proprietăților structurale, termice și electrofizice ale peliculelor subțiri (1) In-Sn-O:Ga, (2) SnO<sub>2</sub> dopate cu Cu, Fe, Ni și Co, (3) SnS, SnS<sub>2</sub>, cât și ale peliculelor subțiri Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> și Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>.

Am stabilit, că la concentrații mai mici de 20% at. a Ga dopant, peliculele In-Sn-O:Ga, obținute atât prin metoda spray-pirolizei, cât și prin metoda pulverizării megnetronice, posedă stare cristalină. Creșterea ulterioară a concentrației de Ga duce la amorfizarea treptată a peliculelor, care este însoțită de hibridizarea modelor de oscilație ale atomilor de metal: In/Sn, In/Ga și Sn/Ga și de o cădere puternică a conductibilității termice. Micșorarea conductibilității termice se explică prin modificarea caracterului transportului de căldură de la cel fononic la cel de difuzie, cât și prin micșorarea vitezei de grup medii a modelor de oscilație. În rezultat, conductibilitatea termică a peliculelor In-Sn-O cu 30 % at. de Ga este de 4 ori mai mică decât a peliculelor cu 5% at. de Ga dopant la temperatura  $T = 300$  K.

Modelarea stărilor electronice în In-Sn-O:Ga, efectuată în cadrul teoriei funcționalului densității, a arătat, că formarea defectelor punctiforme de tip internod cu atomi de Ga demonstrează un comportament donor și duce la apariția a două noi subbenzi electronice CB<sub>1</sub> și CB<sub>2</sub> în comparație cu oxidul pur. Subbanda CB<sub>0</sub> este dominată de orbitalele O-2p și Sn-5s, în timp ce orbitalele O-2p, In-5p, In-5s și Ga-4s contribuie la formarea subbenzii CB<sub>1</sub>. La temperaturi joase CB<sub>2</sub> rămâne total neocupată, iar între CB<sub>1</sub> și CB<sub>2</sub> există o bandă interzisă îngustă de 0,6 eV.

În baza peliculelor de SnS cu grosimi nanometrice de ~ 10 nm au fost confecționate structuri de dispozitive cu microunde și studiate proprietățile de detectare a microundelor, obținând la frecvența de 1 GHz o responsivitate de 30 mV/mW pentru 0 V tensiune aplicată la un nivel de putere la intrare de 16 μW.

A fost proiectat un răcitor termoelectric miniaturizat (sub formă de termocuplu) pe baza straturilor de izolatori topologici Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>, Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> și Bi<sub>1-x</sub>Sb<sub>x</sub>, care face posibilă obținerea efectului de răcire cu 2 °C pe o suprafață de 0,01 cm<sup>2</sup>. Prin metoda de segmentare a fost creat un dispozitiv format din 5 termocupluri, permițând obținerea unei diferențe de temperatură  $\Delta T = 6$  °C la temperatura  $T = 300$  K la aceleași suprafețe transversale. Folia Bi - 16 % at. Sb de tip *n* în calitate de ramură de tip *n* a permis majorarea diferenței de temperatură până la  $\Delta T = 9$  °C pe un termocuplu format din două straturi de tip *p*, conectate în paralel cu folia din Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> și Bi - 16 % at. Sb de tip *n* cu aceeași suprafață transversală.

Rezultatele obținute în cadrul realizării proiectului ar putea contribui atât îmbunătățirii parametrilor de lucru ai convertorilor termoelectrice existenți, cât și apariției unei clase noi de convertori termoelectrice în baza peliculelor subțiri In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>:Sn, Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>, Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> și/sau Bi<sub>1-x</sub>Sb<sub>x</sub>.

Pe baza rezultatelor științifice obținute în cadrul proiectului în anul 2021 au fost publicate **13 articole** în reviste științifice (inclusiv **6 articole** în revistele cu *factor de impact ISI*) și **17 teze** în lucrările conferințelor științifice internaționale și naționale.

Within the second stage of the project **20.80009.5007.02** “*Advanced nanostructured materials for thermoelectric and sensor applications*”, it was continued the study of the structural, thermal and electrophysical properties of thin films (1) In-Sn-O:Ga, (2) SnO<sub>2</sub> doped with Cu, Fe, Ni and Co, (3) SnS, SnS<sub>2</sub>, as well as of thin films Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub> and Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>.

It was shown that at Ga concentrations less than 20% at., In-Sn-O:Ga films obtained both by spray pyrolysis and magnetron pulverization retain their crystallinity. Further increase of the Ga concentration leads to a gradual amorphization of the films, which is accompanied by the hybridization of vibrational modes of metal atoms: In/Sn, In/Ga and Sn/Ga and by a strong drop of thermal conductivity. The decrease of thermal conductivity is explained both by a change in the character of thermal transport from phononic to diffusive, and by a decrease of the average group velocity of vibrational modes. As a result, the thermal conductivity of In-Sn-O films with 30% at. Ga is four times lower than the thermal conductivity of films with 5% at. Ga at a temperature of  $T = 300$  K.

Modeling of electronic states in In-Sn-O:Ga, carried out within the framework of the density functional theory, showed that the formation of interstitial-type point defects by Ga atoms demonstrates a donor character and leads to the appearance of two new electronic subbands CB<sub>1</sub> and CB<sub>2</sub> in comparison with pure oxide. The CB<sub>0</sub> subband is dominated by the O-2p and Sn-5s orbitals, while the O-2p, In-5p, In-5s and Ga-4s orbitals contribute to the formation of the CB<sub>1</sub> subband. At low temperatures CB<sub>2</sub> remains completely unoccupied, while between CB<sub>1</sub> and CB<sub>2</sub> exists a narrow band gap of 0.6 eV.

There were produced microwave device structures based on SnS films with nanometric thickness of  $\sim 10$  nm. It was revealed that such structures demonstrate a 30 mV.mW response to 1 GHz radiation for 0 V applied voltage and 16  $\mu$ W input power.

It was designed a miniaturized thermoelectric cooler (in the form of a thermocouple) based on the layers of topological insulators Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>, Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> and Bi<sub>1-x</sub>Sb<sub>x</sub>, demonstrating two degrees cooling effect ( $\Delta T = 2^\circ$  C) per area of 0.01 cm<sup>2</sup>. A larger temperature difference  $\Delta T = 6^\circ$  C at  $T = 300$  K was achieved in a device consisting of 5 thermocouples with the same transversal surfaces, produced by the segmentation method. It was also demonstrated that a *n*-type sheet from Bi - 16% at. Sb as a *n*-type branch increases the temperature difference up to  $\Delta T = 9^\circ$  C for a thermocouple formed by two *p*-type layers, connected parallel to two *n*-type sheets from Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> and Bi - 16% at. Sb with the same transversal surface.

The results obtained during the project may lead both to the improvement of the existing thermoelectric devices as well as to an emergence of a new class of thermoelectric converters based on thin films from In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>:Sn, Bi<sub>2</sub>Te<sub>3</sub>, Bi<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> and/or Bi<sub>1-x</sub>Sb<sub>x</sub>.

The results of the project were published in **13 research articles** in international peer-reviewed journals (including **6 articles** in journals with ISI impact factor); **17 abstracts** were submitted in 2021 to international and national scientific conferences.

· 19. Recomandări, propuneri

Nu sunt.

Conducătorul de proiect  / Nica Denis

Data:  2021

LS



**Executarea devizului de cheltuieli, conform anexei nr. 2.3 din contractul de finanțare**

Cifrul proiectului: 20.80009.5007.02

Universitatea de Stat din Moldova  
contractul de finanțare nr. 139/1-PS din 04.01.2021

Cheltuieli, mii lei				
Denumirea	Cod		Anul de gestiune 2021	
	Eco (k6)	Aprobat	Modificat +/-	Precizat
Remunerarea muncii angajaților conform statelor	211180	1091,8		1091,8
Contribuții de asigurări sociale de stat obligatorii	212100	262,0		262,0
Servicii editoriale	222910	0,9	-0,9	
Servicii neatribuite altor aliniate	222990		+0,9	0,9
Procurarea materialelor de uz gospodăresc și rechizitelor de birou	336110	10,3		10,3
<b>Total</b>		<b>1365,0</b>		<b>1365,0</b>

Institutul de Inginerie Electronică și Nanotehnologii „D.Ghițu”  
contractul de finanțare nr. 139/2-PS din 04.01.2021

Cheltuieli, mii lei				
Denumirea	Cod		Anul de gestiune 2021	
	Eco (k6)	Aprobat	Modificat +/-	Precizat
Remunerarea muncii angajaților conform statelor	211180	1120,2		1120,2
Contribuții de asigurări sociale de stat obligatorii	212100	324,9	-1,5	323,4
Prime de asigurare obligatorie de asistenta medicală achitate de angajator și angajați pe teritoriul țării	212210		1,5	1,5
Deplasări în interes de serviciu peste hotare	222720	39,4	-7,2	32,2
Servicii neatribuite altor aliniate	222990	1,2	12,4	13,6
Indemnizații pentru incapacitatea temporară de muncă achitate din mijl. financiare ale angaj.	273500	2,4		2,4
Procurarea activelor nemateriale	317110	0,4		0,4
Procurarea pieselor de schimb	332110	0,0	2,4	2,4
Procurarea materialelor pentru scopuri didactice și științifice	335110	28,4	-7,6	20,8
<b>Total</b>		<b>1516,9</b>		<b>1516,9</b>

Conducătorul organizației  / (Șarov Igor)

Contabil șef  / (Cojocaru Liliana)

Conducătorul de proiect  / (Nica Denis)

Data: 11.11.2021



L.Ș.

**Componența echipei proiectului**

**Cifrul proiectului 20.80009.5007.02**

**Echipea Universității de Stat din Moldova**

<b>Echipea proiectului conform contractului de finanțare (la semnarea contractului)</b>						
<b>Nr</b>	<b>Nume, prenume (conform contractului de finanțare)</b>	<b>Anul nașterii</b>	<b>Titlul științific</b>	<b>Norma de muncă conform contractului</b>	<b>Data angajării</b>	<b>Data eliberării</b>
1	Nica Denis	1979	doctor habilitat	0,5	04.01.2021	
2	Korotcenkov Ghennadii	1949	doctor habilitat	1	04.01.2021	
3	Cliucanov Alexandr	1944	doctor habilitat	0,25	04.01.2021	
4	Brinzari Vladimir	1954	doctor	1	04.01.2021	
5	Cocemasov Alexandr	1987	doctor	1	04.01.2021	
6	Boris Iulia	1978	doctor	1	04.01.2021	
7	Zincenco Nadejda	1982	doctor	0,5	04.01.2021	
8	Vatavu Elmira	1978	doctor	0,5	04.01.2021	
9	Isacova Calina	1983		1	04.01.2021	
10	Crîșmari Dmitrii	1984		0,25	04.01.2021	
11	Taracanova Larisa	1945		0,5	04.01.2021	
12	Gaiu Nicolai	1964		1	04.01.2021	
13	Ivanov Mihail	1948	doctor	0,5	04.01.2021	
14	Ascherov Artur	1982		0,5	04.01.2021	
15	Isac-Guțul Tatiana	1977	doctor	0,5	04.01.2021	
16	Crețu Raisa	1959		0,5	04.01.2021	
17	Tacu Nina	1947		0,25	04.01.2021	
18	Ciopcic Irina	1998		0,5	04.01.2021	
19	Cerven Alexandra	1998		0,25	04.01.2021	
20	Gheorghienco Alexei	1997		0,25	04.01.2021	

**Echipea Institutului de Inginerie Electronică și Nanotehnologii „D.Ghițu”**

<b>Echipea proiectului conform contractului de finanțare (la semnarea contractului)</b>						
<b>Nr</b>	<b>Nume, prenume (conform contractului de finanțare)</b>	<b>Anul nașterii</b>	<b>Titlul științific</b>	<b>Norma de muncă conform contractului</b>	<b>Data angajării</b>	<b>Data eliberării</b>
1	Rusu Emil	1944	dr.hab	1	03.01.2021	
2	Ghimpu Lidia	1961	dr.	0.5	03.01.2021	
3	Curmei Nicolae	1989	dr.	0.5	03.01.2021	
4	Leporda Nicolae	1951	dr.	0.5	03.01.2021	
5	Cojocaru Victor	1964	dr.	0.5	03.01.2021	
6	Suman Victor	1967		1	03.01.2021	
7	Morari Vadim	1992		1	03.01.2021	

