

**Rezumatul activității și a rezultatelor obținute în subprogram în anul 2024**  
**INGINERIA MATERIALELOR NANOSTRUCTURATE FUNCȚIONALE**  
**PE BAZA SI, SIGE, ZNO, INGAALN, SNO<sub>2</sub> ȘI IN<sub>2</sub>O<sub>3</sub>**  
(denumirea subprogramului)

Codul subprogramului **011208**

În prima etapă a implementării subprogramului 011208 „*Ingineria materialelor nanostructurate funcționale pe baza Si, SiGe, ZnO, InGaAlN, SnO<sub>2</sub> și In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>*” (anul 2024), au fost studiate teoretic proprietățile structurale, electronice și fononice ale oxizilor In<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 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<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. 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<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 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 In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>: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.

**Summary of Activity and Results Obtained in Subprogram in 2024**  
**ENGINEERING OF FUNCTIONAL NANOSTRUCTURED MATERIALS**  
**BASED ON SI, SiGe, ZnO, InGaAlN, SnO<sub>2</sub>, AND In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>**  
(Subprogram Name)

Subprogram Code **011208**

Within the initial stage of implementing subprogram 011208 "*Engineering of functional nanostructured materials based on Si, SiGe, ZnO, InGaAlN, SnO<sub>2</sub>, and In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>*" (year 2024) we theoretically studied the structural, electronic, and phonon properties of In<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 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 In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. 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 In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

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 In<sub>2</sub>O<sub>3</sub>: 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.