



PN-II-ID-PCCE-2008-1

2010-2012

Codul proiectului finanțat

Se completează de către directorul de proiect

Perioada raportării

FISA DE MONITORIZARE

1. Date personale ale directorului de proiect :

1.1. Nume:	CIMPOESU (FERBINTEANU)
1.2. Prenume:	MARILENA
1.3. Telefon:	0040-726757187
1.4. E-Mail:	marilena.cimpoesu@g.unibuc.ro, mcimpoesu@yahoo.com

2. Instituația coordonatoare a proiectului:

2.1. Denumire Instituție:	UNIVERSITATEA DIN BUCUREȘTI
2.2. Facultate/ Departament:	FACULTATEA DE CHIMIE/DEPARTAMENTUL DE CHIMIE ANORGANICĂ
2.3. Telefon:	004021-2103497
2.4. E-Mail:	marilena.cimpoesu@g.unibuc.ro

3. Titlul proiectului:

(Max 200 caractere)

O NOUA GENERAȚIE DE PARADIGME ÎN MAGNETISMUL MOLECULAR ȘI ȘTIINȚA MATERIALELOR. ANIZOTROPIA MAGNETICĂ ÎN UNITĂȚI COMPLEXE, SISTEME SUPRAMOLECULARE ȘI LA NANO-SCALĂ

4. Modul de utilizare a bugetului:

(cheltuieli reale efectuate din devizul postcalcul)

NR. CRT	DENUMIRE CAPITOL BUGET	VALOARE 2010 (LEI)	VALOARE 2011 (LEI)
1.	CHELTUIELI DE PERSONAL - max. 60% din valoarea totală a contractului	486283.7	1190091.10
2.	CHELTUIELI INDIRECTE (regie) - max. 10% din valoarea totală a contractului	96170.26	296463.00
3.	MOBILITĂȚI - max. 10% din valoarea totală a contractului (se asigură participarea la stagii de documentare-cercetare în țară și străinătate, participări la manifestări științifice naționale și internaționale, organizare WE și SSA))	39992.04	85918.40
4.	CHELTUIELI DE LOGISTICĂ - max. 35% din valoarea totală a contractului pentru derularea proiectului (infrastructura de cercetare, cheltuieli materiale, diseminare etc.)	349237.1	1417578.16

	TOTAL	971683.07	2990050.66
--	--------------	------------------	-------------------

5. Publicații:

5.1. Articole în reviste ISI cu scor relativ de influență calculat

CASETA ARE NUMAR LIMITAT DE CARACTERE. PREZENTAM DOAR JURNAL/PUNCTAJ. LISTA COMPLETA IN ANEXA.

1. INORGANIC CHEMISTRY 2012, 51, 40-50./FI4.326/SRI2.394.
2. INORGANIC CHEMISTRY 2011, 50 (19), 9678-9687./FI2.163/SRI2.394.
3. THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS 2011, 129 (6), 847-857./FI2.903/SRI1.460.
4. INORGANIC CHEMISTRY 2011, 50 (5), 1856-1861./FI4.326/SRI2.394.
5. INORGANIC CHEMISTRY 2012, 51, 864-873./FI4.326/SRI2.394.
6. PHYSICAL REVIEW B 2011, 84(13), 134102./FI1.887/SRI2.552.
7. JOURNAL OF MAGNETISM AND MAGNETIC MATERIALS 2012, 324, 1596-1600./ FI0.845/SRI0.913.
8. SCIENCE TECHNOLOGY ADVANCED MATERIALS 2011, 12, 013001. /FI3.226/ SRI1.192.
9. JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS 2011, 509(5), 2535-2539./FI 2.138/SRI2.966.
- 10.POLYHEDRON 2011, 30, 2127-2131./FI2.034/SRI1.091.
- 11.IEEE TRANSACTIONS ON APPLIED SUPERCONDUCTIVITY 2011, 21(3), 2771-2774./FI 1.035/SRI0.531.
- 12.JOURNAL OF MATERIALS SCIENCE 2012 DOI 10.1007/S10853-011-6238-5./FI1.859/SRI1.005.
- 13.SCRIPTA MATERIALIA 2012, 66, 570-573./FI1.41/SRI 7.513.
14. INORGANIC CHEMISTRY 2010, 49, 9839./FI2.163/SRI2.394.
15. JOURNAL OF MAGNETISM AND MAGNETIC MATERIALS 2009, 321 (24), 4132-4138./FI 1.690/SRI0.913.
16. EUROPHYSICS LETTERS, 2010, 91, 27003./FI 2.893/SRI3.011.
17. JOURNAL OF MAGNETISM AND MAGNETIC MATERIALS 2010, 322 (9-12), 1368-1372./FI1.690/SRI0.913.
18. SUPERCONDUCTOR SCIENCE & TECHNOLOGY 2010, 23, 095002./FI1.201/SRI1.238.
19. SUPERCONDUCTOR SCIENCE & TECHNOLOGY 2010, 23, 105018./FI 1.201/ SRI1.238.
20. CRYSTAL GROWTH & DESIGN 2009, 9(1), 391-394./FI 4.390/SRI3.081.
21. POLYHEDRON 2009, 28(9-10), 2039-2043./FI1.103/SRI1.091.

5.2. Articole cotate ISI fără scor relativ de influență

5.3. Articole în alte reviste indexate ISI și în proceedings de conferințe indexate ISI

5.4. Alt tip de publicație rezultat ca urmare a proiectului (cărți, capitole de carte, brevete, articole în reviste ne-indexate ISI, proceedings de conferințe ne-indexate ISI, etc...).

- 1.CAPITOL DE CARTE: ALDICA, G.; TISEANU,I.; BADICA, P.; CRACIUNESCU, T;RINDFLEISCH, M. (2010). X-RAY MICRO-TOMOGRAPHY AS A NEW AND POWERFUL TOOL FOR CHARACTERIZATION OF MGB2 SUPERCONDUCTOR, SUPERCONDUCTOR, ADIR MOYSES LUIZ (ED.), ISBN: 978-953-307-1
2. ENDO, K; BADICA, P; NANTO, H; ARISAWA, S; YAMASAKI, H; DEVELOS-BAGARINAO, K; ENDO, T. GROWTH OF COMPLEX EPITAXIAL MULTI-COMPONENT OXIDE THIN FILMS AND HETEROSTRUCTURES WITH STRONG ANISOTROPY, MRS PROCEEDINGS 2011, 1368.
3. CIMPOESU, F.; FRECUS, B.; OPREA, C.I.; GIRTU, M.A. THEORETICAL CALCULATIONS OF STRUCTURE AND EXCHANGE COUPLING OF A ROOM-TEMPERATURE MOLECULAR MAGNET, PROCEEDING 7TH INTERNATIONAL CONFERENCE OF THE BALKAN PHYSICAL UNION, EDITED BY A. ANGELOPOULOS, T.FILDISIS, 2009 AMERICAN INSTITUTE OF PHYSICS (978-0-7354-0740-4/09), 1192-1197.

6. Relevanța publicațiilor

Descrieți pe scurt relevanța publicațiilor de la punctul I pentru obiectivele proiectului.

(font Times New Roman, size 12, line spacing 1.5 - Max. 2 pag.)

Rezultatele proiectului urmează firul roșu al paradigmei centrale, anizotropia magnetică, în îngemănarea sa cu alte efecte structurale (cuplaj de schimb, tranziții de fază, supraconductivitate) și în relația cu factorii săi cauzali ori potențiala utilitate în noi concepte tehnologice. Descrierea se raportează la lista de articole [1-21] din caseta 5.1 a fișei de monitorizare și obiectivele notate în format {an.obiectiv}, anii 2010-2012 desemnându-se I, II, III. Anizotropia magnetică este un ingredient esențial pentru alcatuirea unui sistem care să se comporte ca un magnet la scară moleculară, nano- sau extinsă. Lucrările [1] și [2] se prezintă ca un punct nodal, oferind date complexe (sinteză, structură, caracterizare instrumentală și analiză teoretică), unificate sub cheia de boltă a unor noi dezvoltări conceptuale asupra anizotropiei magnetice { II.7, III.3, III.4}. Din cauza mizei importante și a priorității absolute castigate în acest domeniu se impune o pondere sporită a acestor obiective în cadrul proiectului. În [1] este prezentată problematica anizotropiei de tip ZFS a ionilor Gd(III), slabă ca intensitate, dar relevantă în comportarea magnetică a ionilor individuali ori cuplați. În [2] este tratată situația ionilor de lantanid cu anizotropie puternică, datorată pseudo-degenerării orbitale. Am pus la punct o metodologie inovativă de tratare a susceptibilității și magnetizării, realizând simularea la nivel de prime-principii (calculare ab initio) a acestor proprietăți, în bună concordanță cu datele experimentale. O dezvoltare originală propune reprezentarea diagramelor polare ale funcțiilor de magnetizare specifică a fiecărei stări, realizând o descriere vizuală foarte sugestivă a axelor de ușoară magnetizare. Discuția asamblării supramoleculare acoperă obiectivul {II.6}, extins la sisteme f, alături de sistemele d concepute inițial și {III.5} (sisteme Fe(II)-Ln). Lucrarea [10] este preambulul limitat la sinteză și caracterizarea preliminară a unei alte ramuri din tematica bazată pe sisteme coordinative lantanidice {III.4, IV.1}. Lucrarea [5] este de asemenea rezultatul parțial, prealabil unei serii de complecși cu ioni f și liganzi dicarbonilici de tip curcuminoid {III.4, IV.1}, limitându-ne aici doar la caracterizarea efectelor de luminiscentă a ligandului. Coordonata de relaxare implicată în efectele de luminiscentă este propusă ca fiind relaționată cu cea a barierei de relaxare magnetică. Lucrările [3, 21] sunt dedicate unor sisteme prototipice pentru anizotropia ionilor tranzitionali d {I.1, II.2, III.2}, anume complecși cu Mn(III) și derivați de porfirina, cu topologie de octaedru alungit, care, asamblati cu liganzi purtători de spin (e.g. tetraciano-etilena) conduc la compusi de tip magnet unidimensional. S-a realizat tratamentul DFT al proprietăților de schimb (parametri J) și anizotropie (parametri $D < 0$ în Hamiltonianul ZFS), cu explicitarea rolului câmpului liganzilor. O realizare deosebită este obținerea (sinteză și caracterizare) a unei structuri neuzuale, complex de Mn(III) comprimat [14], cu parametru $D > 0$ și proprietatea rară de conversie de spin în configurația d^4 {I.3, II.2}. Implicând încălcarea barierei de interdicție de spin via cuplaj-spin orbita, tranziția de spin, în general, are cauze comune cu anizotropia, fenomenele coexistând și interconditionându-se. În această perspectivă, o serie de lucrări se concentrează pe modelarea fenomenologică a tranziției

de spin [4,6,7,15,16] { I.3, I.4, II.4, II.5 } folosind varietati adaptate ale Hamiltonianului Ising {obiectiv III.3} si experimente numerice originale. S-au realizat studii intensive privind histerezisul termic al particulelor cu tranzitie de spin si o caracterizare inedita a curbelor experimentale pentru nanoparticulele cu tranzitie de spin [4,6]. Un rezultat important consta in modelul Random Anisotropy Ising [17], pentru tratamentul teoretic al anizotropiei in solide {obiectiv III.3}. O alta linie de investigatie abordeaza sinteza si caracterizarea anizotropiei in sisteme solide de diverse tipuri, in particular in supraconductori oxidici si non-oxidici {obiectiv II.5}. In [8] si [11] sunt aduse date de aliniere in camp magnetic a materialelor anizotrope, studii despre dimensiunea si forma probelor aciculare cristaline la cresterea in camp magnetic, folosirea anizotropiei cristalului si a altor artificii pentru obtinerea unor structuri composite ierarhice. In [9] se studiaza rolul dopajelor lantanidice asupra magnetismului in superconductori. In [20] se abordeaza fenomene de epitaxie si topologie in oxizi superconductori cu anizotropie mecanica si electronica (efectul Substrate Lattice Mismatch Anisotropy). Lucrarile [12,13,18,19,20] sunt dedicate obtinerii si caracterizarii unor supraconductori non-oxidici, pe baza de bor {obiectiv I.4}, ce incorporeaza problema interesanta a efectelor anizotropice de banda si structura non-centrosimetrica. Aceste dezvoltari sunt importante in sine cat si ca preambul pentru jonctiunea studiilor de corp solid cu metodologia corelatiilor structura-proprietati stabilite in ramurile cu dedicatie moleculara ale proiectului.

7. Rezultate științifice obținute și nepublicate

Descrieți pe scurt rezultatele științifice obținute și încă nepublicate și relevanța acestora pentru obiectivele proiectului. Indicați strategia de valorificare a acestor rezultate (inclusiv data preconizată pentru publicare).

(font Times New Roman, size 12, line spacing 1.5 - Max. 2 pag.)

8. Resursa umană

Prezentați pe scurt fiecare membru al echipei, cu menționarea tipului de poziție ocupată și a rolului în desfășurarea proiectului.

(font Times New Roman, size 12, line spacing 1.5 - Max. 2 pag.)

Universitatea din Bucuresti, Unitate coordonatoare, P1, coordonator: Conf. Dr. Cimpoșu (Ferbinteanu) Marilena

Marilena Cimpoesu, conf. dr., chimist cu rol in sinteza, masuratori fizice (spectrale, magnetice cristalografice) , interpretare, corelatii structura-proprietati, comunicarea si corelarea informatiilor intre grupuri; Mihaela Badea, conf. dr., chimist, analiza termica si spectroscopie ; Alina Lupu, chimist, asistent cercetare, sinteza sisteme polinucleare si unitati complexe cu anisotropie intrinseca, masuratori spectrale, masuratori cristalografice; Andreea Gheorghe, asistent cercetare, sinteza compusi cu tranzitie de spin, masuratori spectrale, masuratori cristalografice;Olivia Moga, chimist, asistent cercetare, sinteza sisteme polinucleare si unitati complexe cu anisotropie

intrinseca , masuratori spectrale, Larisa Dinu, chimist, asistent cercetare, masuratori spectrale; Silvia Berbeceanu, chimist, asistent cercetare, sinteza sisteme complexe , masuratori spectrale.

Universitatea Ovidius, Constanta, P2, responsabil: Prof. Dr. Gîrțu Mihai;

Gîrțu Mihai, fizician, prof. univ. dr., implicare 25%, coordonatorul echipei P2; Oprea Corneliu, fizician, lect. univ. dr., implicare 50%, calcule chimie cuantică; Moscalu Florin, fizician, lect. univ. dr., implicare 12,5%, administrație și modelare fizică; Frecuș Bogdan, fizician, asist. cercet. drd., implicare doar 10%, drd. la RIT, Stockholm; Panait Petre, fizician, asist. cercet., implicare 100%, calcule chimie cuantică; Enache Irina, chimist, implicare 0%, concediu maternitate.; Stamate Daniela, chimist, asist. cercet. drd., implicare 100%, sinteze și caracterizări chimice, calcule chimie cuantică.

Universitatea Alexandru Ioan Cuza, Iasi, P3, responsabil: Lect. Dr. Enăchescu Cristian;

Cristian Enachescu – modelare prin metode de tip Ising, elaborarea modelului mecanoelastic; masuratori optice si magnetice; Laurentiu Stoleriu – modelare si simulare. modelul mecanoelastic; Radu Tanasa- modelare si simulare, modelul Ising, masuratori magnetice (SQUID); Ilie Bodale – modelare si simulare, masuratori magnetice; Mariana Pavel –modelare si simulare; Alexandra Dobrinescu- modelare si simulare.

Institutul de Chimie-Fizica Ilie Murgulescu, Bucuresti, , P4, responsabil: C.S. II. Dr. Cimpoesu Fănică;

Dr. Fania Cimpoesu este implicat in modelare, inteprerare si calcul, realizind jonctiunea si traducerea informatiei in decursul colaborarii dintre echipa P4 si celelalte grupuri. N. Stanica realizeaza caracterizari preliminare prin masuratori magnetice (pina la temperatura azotului lichid) si participa cu resurse de modelare proprii. N. Osiceanu realizeaza caracterizari xps ale probelor furnizate de P1,P5,P6. G. Dobrinescu colaboreaza cu F. Cimpoesu in scrierea codurilor necesare modelelor originale de anizotropie. T. Spataru realizeaza caracterizarea electrochimica ale combinatiilor complexe furnizate de P1.

Universitatea Alexandru Ioan Cuza, Iasi, P5, responsabil: Conf. Dr. Humelnicu Ionel; Ionel

Humelnicu coordoneaza intreaga activitate a echipei, gestioneaza si tine o evidenta clara si detaliata a tuturor activitatilor de cercetare, valorificare a rezultatelor, financiare si asigura functionalitatea echipei. Redacteaza toate documentele financiare, de raportare si contractuale ale echipei de cercetare. Participa, alaturi de ceilalti membri ai echipei, la activitatea de cercetare teoretica si experimentală; Doina Humelnicu - cercetator cu experinta. Efectueaza sinteze si carcaterizeaza noi compusi ai metalelor tranzitionale cu posibile proprietati magnetice care se incadreaza in tematica proiectului; Dan Maftai - tanar cercetator. Efectueaza investigatii teoretice, structurale si de reactivitate, contribuie la formarea de modele teoretice si de analiza ale compusilor investigati; Carmen Felicia Dascalu - doctorand. Participa la investigarea proprietatilor magnetice ale structurilor studiate.

Institutul National de Cercetare-Dezvoltare pentru Fizica Materialelor, Magurele, P6, responsabil:
C.S. I. Dr. Bădică Petre.

Petre Badica, inginer, specializare in stiinta si ingineria materialelor, c.s.I dr., stiinta materialelor si fizica aplicata in domeniul supraconductorilor, metode de preparare neconventionale, caracterizari complexe ale materialelor; Lucica Miu, fizician, c.s.I dr., fizica starii solide, interpretare date, modelare, simulare; Gheorghe Aldica, fizician, c.s.I dr., masuratori electrice si de transport, efecte termo-magneto-electrice, analiza termica, masuratori XRD; Viorela Sandu, fizician, c.s.I dr., fizica starii solide, fabricare si caracterizarea complexa de filme subtiri supraconductoare, structura, morfologie, proprietati electrice si magnetice; Stelian Popa, inginer, c.s.I dr., fizica starii solide, experienta in supraconductie, criogenie, masuratori magnetice si electrice; Ion Ivan, fizician, asistent cercetare, caracterizari sisteme oxidice, supraconductori.

9. Utilitatea echipamentelor

Pentru echipamentele achiziționate din proiect și al caror cost depășește 20000 RON (inclusiv TVA) descrieți pe scurt modul în care au fost folosite pentru îndeplinirea obiectivelor proiectului.

(font Times New Roman, size 12, line spacing 1.5 - Max. 2 pag.)

P1.

Sistem ATR cu control de temperatura, pentru spectrofotometru FT-IR Jasco 4200 (57197.42 RON) -util pentru caracterizari curente (identificare compozitiei in grupari functionale si modurilor de coordinare) pe parcursul sintezelor de liganzi si complecsi.

Sistem de difracție cu raze X pentru analize cristalografice pe monocristal, cu plata in etape 1183900 RON (2011) si 314020 RON (2012). Acest dispozitiv este esential pentru caracterizarea structurala a sistemelor abordate ca studiu de caz si sintetizate de echipele P1, P5,P6, interpretate in colaborare cu echipele P2, P3,P4.

P2.

Sistemul de calcul (99756.76 RON) conține o stație de lucru IBM X3850 X5, cu 4 procesoare Intel Xeon, fiecare cu câte 4 nuclee, 128 GB RAM, un sistem de protecție electrică tip UPS 3000VA și un dulap pentru calculator tip Rack 19” cu accesoriile aferente. Sistemul de calcul este folosit la rulara programelor de modelare și simulare prin chimie cuantică, precum GAUSSIAN, GAMESS, ADF, MOLCAS, necesare in partea de teorie structurala si modelare.

P3.

Criostat pentru masuratori optice la temperaturi pana la 2.8K, in valoare de (171591,20 RON) cu plata partiala (126000 RON decontat din acest proiect). Acesta se adauga la instalatia de masuratori optice deja existenta la P3, utila caracterizarii spectrale avansate a complexilor cu dinamica de spin si structura electronica.

P4.

Statie de calcul de mare putere tip Server SUPERMICRO (plata partiala) 75838.40 RON din care valoare decontata din proiect 17198.86 RON. Necesara modelarii teoretice si computationale.

P5.

Componenta ATR - valoare 33,851.96 lei - cristal diamant, la spectrofotometrul Bruker, model Alpha-T, existent in dotarea laboratorului de cercetare al echipei P5. Achizitia a fost necesara pentru a investiga rapid, usor si precis, structura, furnizata de spectrele de vibratie, pentru compusii sintetizati sau investigati aflatii in stare de agregare lichida sau solida.

P6.

Nu are achizitii majore depasind pragul 20000 RON.

10. Dificultăți întâmpinate în derularea proiectului

Prezentați succint (maxim 2 pagini) dificultățile și obstacolele întâmpinate și care au afectat negativ derularea proiectului. Propuneți soluții de remediere a acestor probleme.

(Max. 2 pag. - font Times New Roman, size 12, line spacing 1.5)

Decalarea contractării și demarării proiectului (2010) față de momentul concepției și aprobării sale (2008) a determinat schimbări de importanță relativă în ponderea și esalonarea obiectivelor, precum și dificultăți în schema logistică asociată acestora.

Astfel, obiectivele {I.2}, {II.6} și {III.1}, dedicate anizotropiei de tip d, mutual relate au interferat și au fost translate în finalizare cumulată către anul III, în contrapondere cu atenția suplimentară și miza de concurență internațională legată de tematica anizotropiei de tip f {II.7, III.3, III.4}, tratată în avans și augmentată intensiv și extensiv. Acesta nu este propriu-zis un neajuns ci o permutare de obiective, ca urmare a relevanței rescalate, impusă de reverberațiile decalajului elaborare proiect vs. contractare și demarare. În aceeași conjunctură s-a impus decalarea finalizării obiectivului II.1, cu datele completate, dar care, având o miză mai redusă, a fost pus în plan secund în programul de publicare. Obiectivul {II.5} cu liganzi macrociclici se afla în relativă dificultate, întrucât după sinteza laborioasă a liganzilor, apar complexități suplimentare în etapa de caracterizare structurală, obiectivul fiind continuat pe parcursul întregului an III, cu concluzionarea datelor existente înspre perioada finală (octombrie-noiembrie). Aceasta nu afectează însă vizibilitatea brandului de pionierat în tematica anizotropiei, în sisteme moleculare și extinse, deja conturat prin lucrările de înalt impact realizate. Alte câteva etape de rutină în procedurile de caracterizare structurală legate de obiectivele {II.3, II.4 II.6} au fost întârziate de achiziția tardivă a aparatului de difracție, de asemenea fără ca aceasta să împiedice propriu-zis corpul proiectului întrucât datele necesare au fost rezolvate în finalul anului II, urmând a fi reesalonate, ca elaborare de articole, în faza actualului an III.

Procedurile complicate de achiziție în cadrul birourilor administrative de la Universitatea București a investiției principale (difracție cu raze X) au determinat întâzieri în caracterizarea probelor legate de obiectivele menționate mai sus. Consecințele întâzirii achizițiilor majore sunt constatate și la Universitatea A. I. Cuza din Iași.

**PRIN ACEASTA SE CERTIFICA LEGALITATEA ȘI CORECTITUDINEA
DATELOR CUPRINSE ÎN PREZENTUL FIȘEI DE MONITORIZARE**

DATA: 7.03.2012

DIRECTOR DE PROIECT,

Nume, prenume: Cimpoesu Marilena
Semnatura