

ANEXA 2

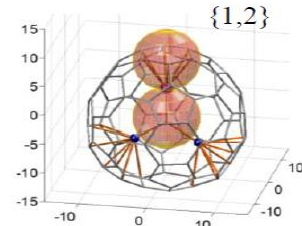
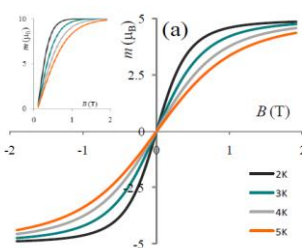
pag...../.....

Institutul de Chimie Fizică "Ilie Murgulescu" din București¹

FIȘA DE EVIDENȚĂ Nr.....					
a rezultatelor activităților de cercetare-dezvoltare					
			TABEL NR. 1 ²		
DENUMIREA PROIECTULUI	Dezvoltari metodologice si experimente teoretice asupra regimului de legatura si proiectarea proprietatilor De la atomi la			CATEGORIA DE PROIECT IDEI, Proiect de cercetare exploratorie	
CONTRACT DE FINANȚARE	NR 14 DATA	DURATA CONTRACT	40 LUNI	ACRONIM PROGRAM	
VALOAREA PROIECTULUI (INCLUSE ALTE SURSE)	1.125.000,00		VALOAREA CONTRACTULUI DE FINANȚARE (INCLUSE ALTE SURSE)		1.125.000,00
REZULTATELE CERCETĂRII APARTIN	1 ³ 2			CONFORM ART DIN CONTRACTUL NR	

2) CATEGORIA REZULTATULUI
(conform art. 74, [O.G. 57/2002](#))

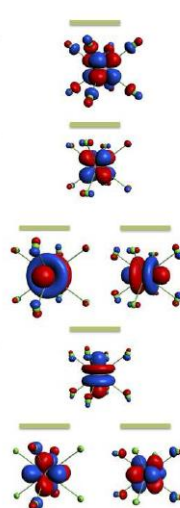
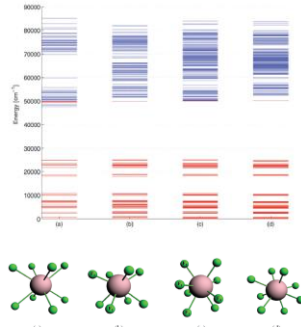
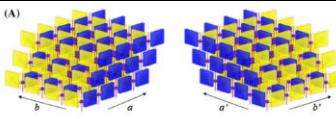
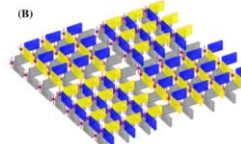
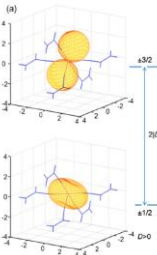
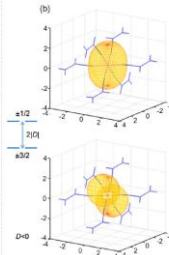
2.1 documentații, studii, lucrări

Rezultat final	CARACTERISTICI ALE REZULTATULUI FINAL	Sinopsis
Inovatii conceptuale. Considerînd sistemul DySc ₂ N@C ₈₀ drept prototip pentru fullerene endoedrice cu functie de magnet mono-ionic (single ion magnet-SIM), prezentăm inovatii metodologice și calculele de ultimă generație care analizează structura electronică și relația sa cu proprietățile magnetice determinate de ionul Dy (III).	Articol stiintific ISI. <i>The Theoretical Account of the Ligand Field Bonding Regime and Magnetic Anisotropy in the DySc₂N@C₈₀ Single Ion Magnet Endohedral Fullerene.</i> Cimpoesu Fanica, Dragoie Nita, Ramanantoanina Harry, Urland Werner, Daul Claude A., PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS/ Vol. 16, 2014	 

¹ denumirea persoanei juridice executante (persoană juridică executantă este considerată persoana juridică care a obținut rezultatele cercetării, în mod nemijlocit, conform art. 74 alin. (3) [din O.G. nr. 57/2002](#))

² se completează o singură dată, la 30 de zile de la data aprobării raportului de activitate al proiectului de cercetare-dezvoltare

³ se completează denumirea partenerilor la proiectul de cercetare-dezvoltare care au contribuit la obținerea rezultatului

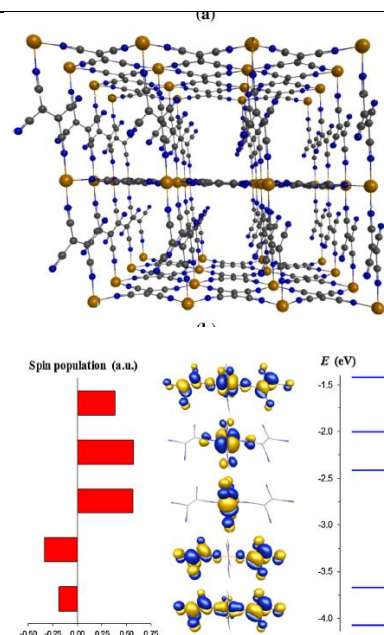
Inovatii conceptuale. Probam aplicabilitatea Modelului Acoperirii Angulare (Angular Overlap Model -AOM) pentru tratarea structurii electronice in compuși lantanidici, care prezinta un interes deosebit in proiectarea proprietatilor de luminescența.. Funcționarea scintilatorilor este determinata de tranzițiile f-d, care necesită un nou tip de modelare de tipul cimpului liganzilor.	Articol stiintific ISI <i>The Angular Overlap Model extended for two-open-shell f and d electrons,</i> Ramanantoanina Harry, Urland Urland, Cimpoesu Fanica, Daul Claude, PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS/ Vol. 16, 2014	b_{2u} b_{1u} e_u a_{2u} e_u 																																																		
Inovatii conceptuale. Dezvoltam noi metode ale a teoriei câmpului liganzilor, pe deplin compatibilizate cu instrumentele actuale ale chimie cuantică. Prezentăm noi metodologii pentru estimarea parametrilor Slater-Condon și de cuplare spin-orbită, de importanță în parametrizarea non-empirică a câmpului liganzilor, contribuind la proiectarea scintilatorilor moderni folositi la reglarea spectrului diodelor electroluminiscente (LED).	Articol stiintific ISI <i>Ligand field density functional theory for the prediction of future domestic lighting,</i> Ramanantoanina Harry, Urland Werner, Garcia-Fuente Amador, Cimpoesu Fanica, Daul Claude, PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS/ Vol. 16, 2014	 <table><tr><th></th><th>CaF₂:Pr³⁺</th><th>KY₃F₁₀:Pr³⁺</th><th>BaY₂F₈:Pr³⁺</th><th>LaZrF₇:Pr³⁺</th></tr><tr><td>$F_2^0(\Pi)$</td><td>329.4</td><td>329.5</td><td>331.6</td><td>330.2</td></tr><tr><td>$F_2^0(\Pi)$</td><td>42.7</td><td>42.7</td><td>42.9</td><td>42.8</td></tr><tr><td>$F_2^0(\Pi)$</td><td>4.5</td><td>4.5</td><td>4.6</td><td>4.7</td></tr><tr><td>$A_2^0(d)$</td><td>53 473</td><td>53 288</td><td>53 495</td><td>53 098</td></tr><tr><td>$G_1(d)$</td><td>322.3</td><td>251.4</td><td>266.7</td><td>285.5</td></tr><tr><td>$F_2^0(d)$</td><td>219.0</td><td>170.5</td><td>178.7</td><td>190.2</td></tr><tr><td>$G_2(d)$</td><td>28.6</td><td>20.9</td><td>23.0</td><td>24.5</td></tr><tr><td>$F_4^0(d)$</td><td>16.7</td><td>12.3</td><td>13.3</td><td>14.2</td></tr><tr><td>$G_3(d)$</td><td>4.5</td><td>3.2</td><td>3.6</td><td>3.8</td></tr></table>		CaF ₂ :Pr ³⁺	KY ₃ F ₁₀ :Pr ³⁺	BaY ₂ F ₈ :Pr ³⁺	LaZrF ₇ :Pr ³⁺	$F_2^0(\Pi)$	329.4	329.5	331.6	330.2	$F_2^0(\Pi)$	42.7	42.7	42.9	42.8	$F_2^0(\Pi)$	4.5	4.5	4.6	4.7	$A_2^0(d)$	53 473	53 288	53 495	53 098	$G_1(d)$	322.3	251.4	266.7	285.5	$F_2^0(d)$	219.0	170.5	178.7	190.2	$G_2(d)$	28.6	20.9	23.0	24.5	$F_4^0(d)$	16.7	12.3	13.3	14.2	$G_3(d)$	4.5	3.2	3.6	3.8
	CaF ₂ :Pr ³⁺	KY ₃ F ₁₀ :Pr ³⁺	BaY ₂ F ₈ :Pr ³⁺	LaZrF ₇ :Pr ³⁺																																																
$F_2^0(\Pi)$	329.4	329.5	331.6	330.2																																																
$F_2^0(\Pi)$	42.7	42.7	42.9	42.8																																																
$F_2^0(\Pi)$	4.5	4.5	4.6	4.7																																																
$A_2^0(d)$	53 473	53 288	53 495	53 098																																																
$G_1(d)$	322.3	251.4	266.7	285.5																																																
$F_2^0(d)$	219.0	170.5	178.7	190.2																																																
$G_2(d)$	28.6	20.9	23.0	24.5																																																
$F_4^0(d)$	16.7	12.3	13.3	14.2																																																
$G_3(d)$	4.5	3.2	3.6	3.8																																																
Inovatii conceptuale. Am proiectat calculele cuantice pentru a răspunde unor întrebări încă nerezolvate privind structura materialelor de tip V [TCNE] x (TCNE = tetraciano-etilena, primul magnet molecular cu punct critic la temperatura camerei. Am identificat sursele dezordinii structurale, explicînd natura amorfă și non-stoichiometrică a sistemului .	Articol stiintific ISI <i>Disorder, exchange and magnetic anisotropy in the room-temperature molecular magnet V[TCNE](x) - A theoretical study,</i> Cimpoesu Fanica, Frecus Bogdan, Oprea Corneliu, Panait Petre, Girtu Mihai, COMPUTATIONAL MATERIALS SCIENCE/ Vol. 91, 2014	(A)  (B)  (a)  (b) 																																																		

Inovatii conceptuale.

Calculule DFT in metodologia simetriei suprimate (Broken Symmetry) pe sisteme $V[TCNE]_2$ indică alinierea antiparalentă a spinilor rezultând ordonarea ferimagnetică, cu o valoare absoluta mare a cuplajului de schimb. Date suplimentare se obțin prin intermediul unor calcule multiconfiguraționale efectuate pe modele moleculare mai mici decupate din rețeaua cristalină optimizată. Explicăm mecanismul de cuplare antiferomagnetic pe căi de superschimb.

Articol stiintific ISI

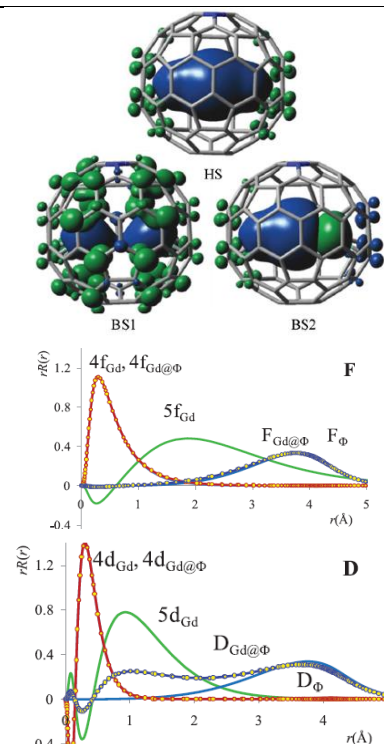
Ab initio study of exchange coupling for the consistent understanding of the magnetic ordering at room temperature in $V[TCNE]_x$, Frecus Bogdan, Oprea Corneliu, Panait Petre, Ferbinteanu Marilena, Cimpoesu Fanica, Girtu Mihai, THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS/ Vol. 133, 2014

**Inovatii conceptuale.**

O serie de experimente computaționale efectuate cu diferite metode aparținând teoriilor funcționalului densității sau funcțiilor de unda multiconfiguraționale abordează problema regimului de legătură și cuplajul de schimb în fulerene encapsulind dimeri de gadoliniu. Sistemul $Gd_2@C_{80}$ este dovedit ca avind o cuplare de schimb foarte slabă, în timp ce $Gd_2@C_{79N}$ a preyinta cuplaj puternic și o stare fundamentală feromagnetică.

Articol stiintific ISI

On Exchange Coupling and Bonding in the $Gd_2@C_{80}$ and $Gd_2@C_{79N}$ Endohedral Dimetallo-Fullerenes, Cimpoesu Fanica, Frecus Bogdan, Oprea Corneliu, Ramanantoanina Harry, Urland Werner, Daul Claude, MOLECULAR PHYSICS/ Vol. 113, 2015

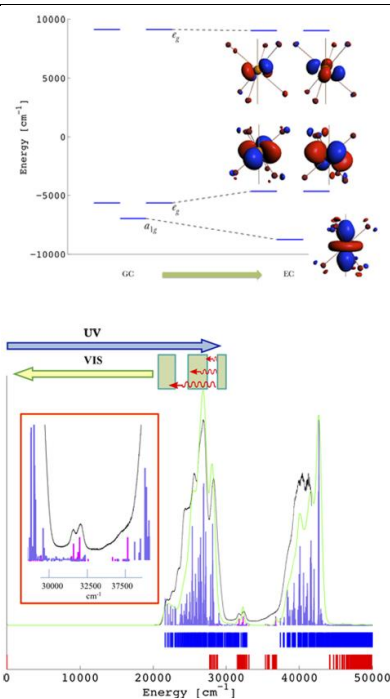


Inovatii conceptuale.

Cea mai eficientă modalitate de a furniza iluminat domestic este tehnologia diodelor emițătoare de lumină (LED), combinată cu scintilatorii care schimbă emisia albastră și UV spre un spectru de lumină albă. Proiectarea scintilatorilor pe bază de lantanid este o sarcină dificilă, din punct de vedere experimental și tehnic. Oferim prospecții valoroase print-o abordare teoretică inovatoare, complicată la nivel conceptual și în eforturile de calcul, rezolvînd rațional relația structura –proprietăți, în căutarea celor mai bune materiale.

Articol stiintific ISI

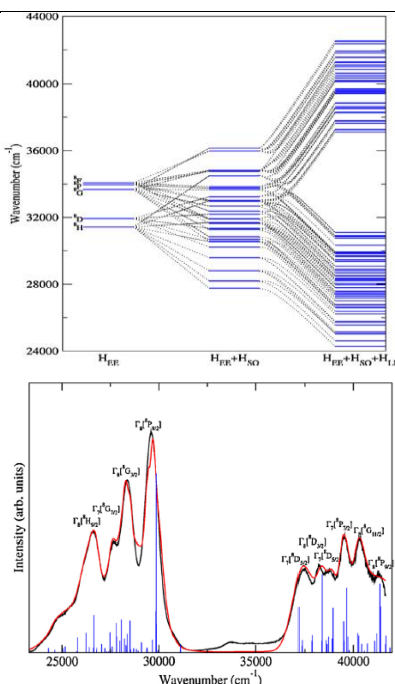
Prospecting Lighting Applications with Ligand Field Tools and Density Functional Theory: A First-Principles Account of the 4f(7)-4f(6)5d(1) Luminescence of CsMgBr3:Eu2+, Cimpoesu Fanica, Ramanantoanina Harry, Goettel Christian, Sahnoun Mohammed, Herden Benjamin, Suta Markus, Wickleder Claudia, Urland Werner, Daul Claude, INORGANIC CHEMISTRY/Vol. 54, 2015

**Inovatii conceptuale.**

Raționalizarea teoretică a configurațiilor dublu strat deschis, 4f și 5d, în ioni Eu(II) nu este deloc trivială, deoarece implică o versiune non-standard a teoriei câmpului de ligand, bazată pe un hamiltonian cu două subsisteme. Am dezvoltat o metodologie bazată pe teoria câmpului liganzilor, luînd sistemul CsCaBr3: Eu2+ ca studiu de caz, unde avem o sferă de coordonare octaedrică a europiului. Parametrii mono-, bi-terelectronici și spin-orbită sint deduși din datele experimentale. Atribuirea tranzițiilor a fost realizată dezvoltînd un model al intensităților spectrale.

Articol stiintific ISI

A ligand field theory-based methodology for the characterization of the Eu2+ [Xe]4f(6)5d(1) excited states in solid state compounds, Cimpoesu Fanica, Garcia-Fuente Amador, Ramanantoanina Harry, Herden Benjamin, Daul Claude, Suta Markus, Wickleder Claudia, Urland Werner, CHEMICAL PHYSICS LETTERS/ Vol. 622, 2015

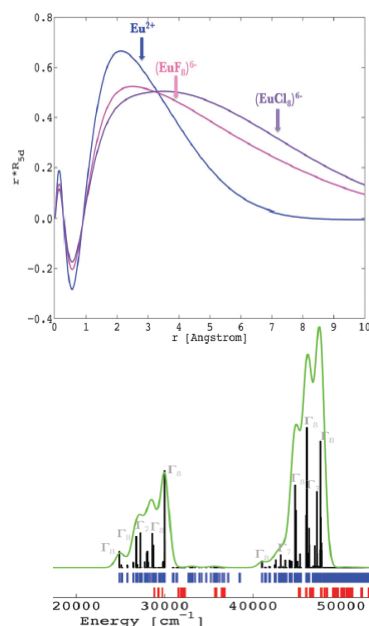


Inovatii conceptuale.

Aici extindem modelul la calculul intensităților tranzițiilor f - d, permițând simularea curbelor spectrale. Ne concentrăm asupra sistemelor bazate pe Eu^{2+} : acest ion de lantanid suferă multe tranziții permise prin dipol de la starea inițială $4f^7$ ($8S_{7/2}$) la cele $4f^65d1$ finale, avînd. Calculele relativiste au arătat un bun acord cu datele experimentale pentru un ion liber, producînd valori fiabile pentru parametrii Slater-Condon și spin-orbită. Specii de tip fluorit dopat cu ioni Eu^{2+} , $\text{CaF}_2: \text{Eu}^{2+}$ și $\text{SrCl}_2: \text{Eu}^{2+}$, în centre cu simetrie octaedrică, sînt studiate în detaliu.

Articol științific ISI

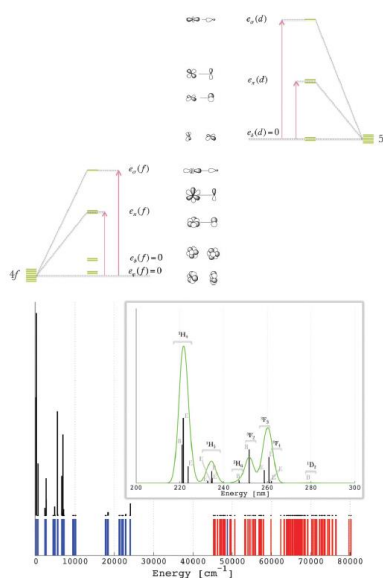
Development and applications of the LFDFT: the non-empirical account of ligand field and the simulation of the f-d transitions by density functional theory, Cimpoesu Fanica, Ramanantoanina Harry, Sahnoun Mohammed, Barbiero Andrea, Ferbinteanu Marilena, PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS/ Vol. 17, 2015

**Inovatii conceptuale.**

Prezentăm o lucrare detaliind structura electronică și proprietățile optice ale centrului $(\text{PrF}_8)^{5-}$ - încorporat în LiYF_4 , completînd perspectiva cu date care nu sînt disponibile pe linii experimentale. Bazîndu-se pe mediul local de coordonare, relația structura - proprietățile optice este construită prin calcule în cadrul teoriei funcționalului de densitate împreună cu analizele teoriei cîmpului liganzilor descriind tranzițiile $[\text{Xe}] 4f^2 \rightarrow [\text{Xe}] 4f15d1$ determinînd activitatea de luminofor.

Articol științific ISI

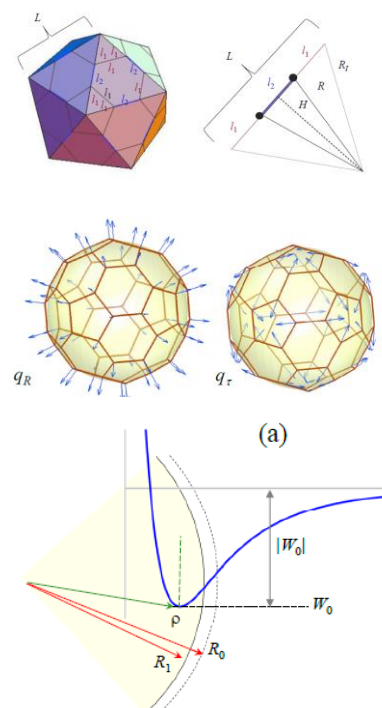
Tailoring the optical properties of lanthanide phosphors: prediction and characterization of the luminescence of Pr^{3+} -doped LiYF_4 , Cimpoesu Fanica, Ramanantoanina Harry, Urland Werner, Herden Benjamin, Daul Claude, PHYSICAL CHEMISTRY CHEMICAL PHYSICS/ Vol. 17, 2015



Inovatii conceptuale.

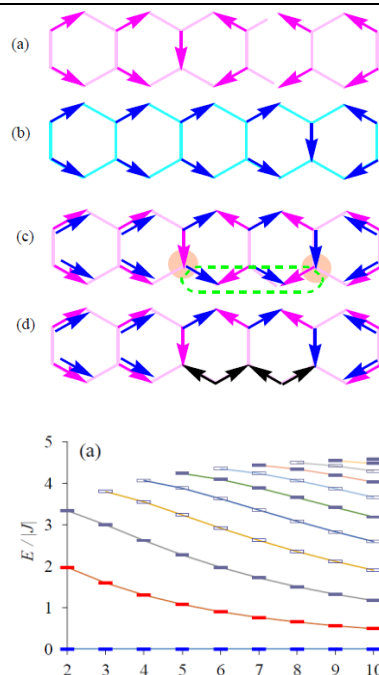
Această lucrare este dedicată unui test special, care verifică capacitatea calculelor teoriei funcționalului densității în descrierea efectelor la distanță. Cazul particular al atomilor de gaz nobil endoedric în fullerenul C₆₀ pune mai multe provocări metodologice, cum ar fi problema instabilității numerice în balanța interacțiunilor covalente cu cele non-covalente. Am proiectat o procedură bazată pe deplasările vibraționale de frecvență în cuplurile C₆₀ vs. Ng @ C₆₀, care tratează problema într-un mod bine temperat. Anume, scara energetică a vibrațiilor investigate este comparabilă cu cea a parametrilor de interacțiune van der Waals.

Articol științific ISI
Noble Gas Endohedral Fullerenes, Ng@C₆₀
 (Ng=Ar, Kr): A particular benchmark for assessing the account of non-covalent interactions by Density Functional Theory calculations,
 Cimpoesu Fanica, Oprea Corneliu, Buta Cristina, Frecus Bogdan, Stroppa Alessandro, Putz Mihai,
 THEORETICAL CHEMISTRY ACCOUNTS/ Vol. 135, 2016

**Inovatii conceptuale.**

Hidrocarburile liniare poliacenice C_{4n+2}H_{2n+2} constând în condensarea liniară a inelelor hexagonale aromatice n au fost utilizate în studiile prototipice ale delocalizării electronice, relevante pentru efectele de conducție. Rezultatele calculelor prin modele simplificate analitice, cum ar Hamiltonianul de spin Heisenberg, generînd o fenomenologie de tip Valence Bond. Se arată că structurile de rezonanță formează un spațiu cu interacțiuni de configurație în care mobilitatea electronilor, exprimată ca polarizarea electronică a moleculei, rezultă dintr-o amestecare a stărilor fundamentale și excitate sub un câmp electric aplicat extern.

Articol științific ISI
Electronic Structure of Linear Polyacenes,
 Cimpoesu Fanica, Buta Cristina, Ferbinteanu Marilena, Philpott Michael R., Stroppa Alessandro, Putz Mihai,
 CURRENT ORGANIC CHEMISTRY/ Vol. 21, 2017

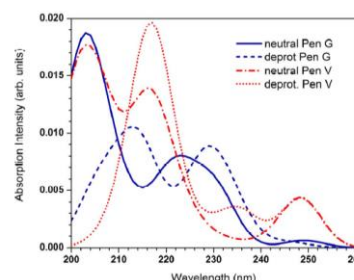
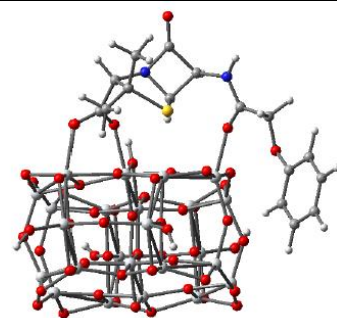


Inovatii conceptuale.

Raportăm rezultatele calculelor prin teoria funcționalului densității, aplicate asupra penicilinei G și penicilinei V adsorbite pe nanoclusteri de TiO₂, pentru a studia degradarea fotocatalitică în iradiere cu lumină ultravioletă și lumină vizibilă. Analizăm spectrul de absorbție al penicilinei libere și adsorbite, configurațiile de legare și probabilitatea transferului de sarcină pe substrat.

Articol proceeding.

DFT Study of Binding and Electron Transfer from Penicillin to a TiO₂ Nanocluster: Applications to Photocatalytic Degradation, Oprea Corneliu, Lucian C., Girtu Mihai, The 5th IEEE International Conference on E-Health and Bioengineering - EHB, 2015

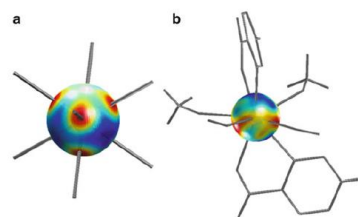
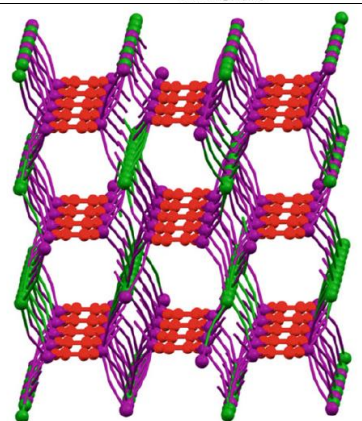


Colectare de date si inovatii conceptuale.

Prezentăm o selecție de date pe rețele de tip metal-organice organice bazate contacte d-f și f-f, discutând trăsăturile și proprietățile lor structurale din punct de vedere experimental și teoretic. Oferim o prezentare generală a metodologiilor proprii de sinteză și modelare, subliniind complexitatea abordării interdisciplinare dezvoltate. Sunt analizate deasemenea strategiile experimentale și computaționale semnificative ale altor cercetători și grupuri din domeniu.

Capitol carte, editura international

Metal-Organic Frameworks with d-f Cyanide Bridges: Structural Diversity, Bonding Regime, and Magnetism - Capitol in *LANTHANIDE METAL-ORGANIC FRAMEWORKS Book Series: Structure and Bonding*, Ferbinteanu Marilena, Cimpoesu Fanica, Tanase Stefania, SPRINGER-VERLAG, 2015

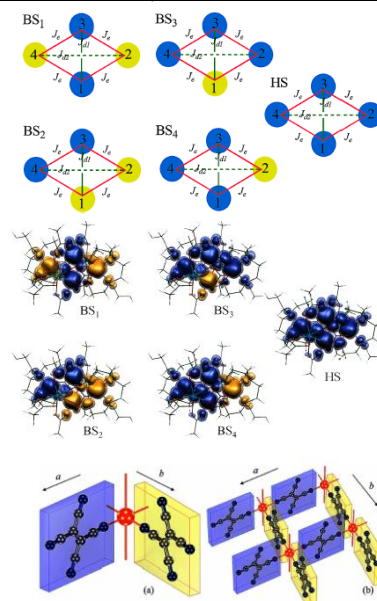


Colectare de date si inovatii conceptuale.

În căutarea materialelor cu dimensiuni nanometrice cu aplicații potențiale în tehnologii și dispozitive noi, magnetismul molecular bazat pe sistemele coordinative reprezintă o cale valoroasă, pe abordabilă în cheia raționamentelor structurale. Sistemele polinucleare sint deja în gama nanometrică și multe materiale magnetice consacrate care pot fi preparate la granulația la scară nano, cum ar fi oxizii, au ca mecanisme de cuplare și de schimb aceleași motoare cauzale identificate în sistemele coordinative. Bazându-se pe această paradigmă, sint luate mai multe studii de caz.

Capitol carte, editura international

Case Studies in the Challenge of Properties Design at Nanoscale: Bonding Mechanisms and causal Relationship
Cimpoesu Fanica, Ramanantoanina Harry, Ferbinteanu Marilena
– Capitol in **Sustainable Nanosystems Development, Properties, and Applications**
IGI Global 2016



Colectare de date si inovatii conceptuale.

Lucrarea trasează o investigație de-a lungul mai multor zone care implică cuvântul-cheie cuplaj de spin, înțeles ca o paradigmă foarte generală a legăturii chimice, în special în a sistemele aromatice delocalizate. O arie distinctă este dedicată grafenilor cu spin indus din motive topologice, luând sisteme triunghiulare ideale (triangulene) ca studiu de caz. Oferim considerente structurale originale și o clasificare consecventă. Partea speculativă privind membrii înalți ai clasei este bine temperată cu concretețea din analiza membrilor inferiori sintetizați, cu accent pe derivatele nucleului de fenalinel.

Capitol carte, editura internationala

The Spin Coupling in the Polyaromatic Hydrocarbons and Carbon-based Materials
– Capitol in **Organic synthesis and carbon related materials: Polymers, carbon nanocomposites, graphene** - Dedicated to Nobel Laureate Prof. Akira Suzuki for his 85th birthday

