

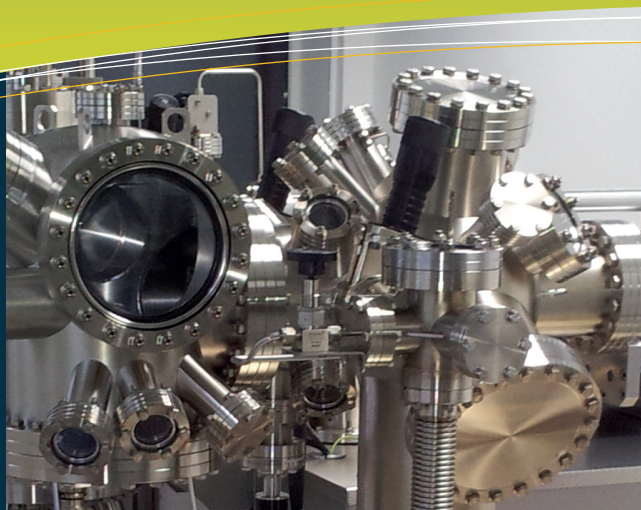
DECEMBRIE
2012

Infrastructură de cercetare la standarde europene

În urma competiției naționale lansate în anul 2008 pentru finanțarea de proiecte care au avut în vedere dezvoltarea infrastructurii de cercetare-dezvoltare existente și crearea de noi infrastructuri de cercetare-dezvoltare, INC DTIM Cluj-Napoca a obținut finanțarea necesară pentru proiectul Modernizarea Departamentului de Fizică Moleculară și Biomoleculară.

Proiect susținut integral de Guvernul României

În cadrul proiectului au fost investite fonduri în valoare de 30034930 lei. Proiectul a fost finanțat de către Autoritatea Națională pentru Cercetare Științifică (ANCS) și Unitatea Executivă pentru Finanțarea Învățământului Superior, a Cercetării, Dezvoltării și Inovării (UEFISCDI) în cadrul Programului CAPACITĂȚI și s-a derulat în perioada 2008-2012. Obiectivul central al proiectului l-a constituit alinierea Departamentului de Fizică Moleculară și Biomoleculară DFMB al INC DTIM la standardele de excelență ale Uniunii Europene.



echipamente pentru

Modelare moleculară

Sinteză și fabricație

Caracterizare

explorarea materiei la nivel nanoscopic

Este destinat modernizării Departamentului de Fizică Moleculară și Biomoleculară prin achiziționarea unei infrastructuri de cercetare ultramoderne. Au fost înființate trei noi laboratoare de cercetare și au fost modernizate șapte laboratoare existente.

Va permite extinderea și diversificarea activităților de cercetare, contribuind la transformarea institutului într-un pilon regional al dezvoltării bazate pe cunoaștere.

MDFMOLBIO proiect implementat la Institutul Național de Cercetare-Dezvoltare pentru Tehnologii Izotopice și Moleculare INCDTIM Cluj-Napoca

Este organic integrat în strategia de dezvoltare a activităților de cercetare-dezvoltare-inovare ale INC DTIM în intervalul 2007-2013.

Infrastructura rezultată va permite absorbția de forță de muncă înalt calificată din rândul absolvenților universităților din Cluj, din țară sau din străinătate.

Soluții Tehnologice

Proiectul MDFMOLBIO a fost implementat la INCDTIM Cluj-Napoca în perioada 2008 - 2012 și a avut drept scop principal modernizarea infrastructurii de cercetare a Departamentului de Fizică Moleculară și Biomoleculară.

Obiectivele proiectului au fost realizate în întregime, generând la final o bază de cercetare modernă care va permite departamentului să devină un actor important pe piața de C-D din domeniul fizicii moleculare și biomoleculare. Clădirea pe trei nivele a departamentului a fost mai întâi reabilitată din fonduri proprii, iar apoi echipată cu infrastructură de cercetare de ultimă generație. Echipamentele achiziționate au contribuit la consolidarea laboratoarelor existente, dar și la crearea de laboratoare noi pentru fabricație și caracterizare la scală nanoscopică.

Proiectul a fost conceput în baza unei viziuni integratoare, centrată pe nevoia de a parcurge întreaga gamă de activități specifice tehnologiilor moleculare, de la proiectarea și modelarea moleculară *in silico*, la (nano)fabricație, iar în final la caracterizare prin intermediul celor mai avansate tehnici analitice. Această viziune oferă soluțiile tehnologice necesare creșterii potențialului de cercetare al INCDTIM.

Componentele principale ale infrastructurii sunt:

1. Camera curată – laborator cu condiții de înaltă puritate ce găzduiește echipamentele de fabricație și de analiză a structurilor supramoleculare:

- 1.1. sistem de tip *Molecular Beam Epitaxy* (MBE)
- 1.2. dispozitiv integrat pentru *Dip-Pen Nanolithography* (DPN) - *molecular inkjet printing*
- 1.3. dispozitiv integrat pentru *Nano-Imprint Lithography* (NIL)

2. Microscopie de tip scanning probe de înaltă rezoluție (la scala atomică) pentru:

- 2.1. Scanning Tunneling Microscopy (STM)
- 2.2. Atomic Force Microscopy (AFM)

3. Sistem laser în pulsuri ultracurte (femtosecunde):

- 3.1. sursă de femtosecunde acordabilă între 200 și 2000 nm
- 3.2. spectrometre de absorbție tranzientă și de fluorescență

4. Cluster de calculatoare pentru high-performance computing (HPC) destinat simulărilor numerice și modelării moleculare

5. Laborator ultra-modern de sinteză / analiză chimică și biochimică

6. Spectrometru RMN de înaltă rezoluție pe solide (NMR)

7. Difractometru de raze X pe monocristale (XRD)

8. Spectrometru de dicroism circular vibrațional (VCD) și spectrometru Raman confocal

9. Echipamente de spectroscopie fototermică și calorimetrie: cameră termografică NIR profesională

10. Echipamente de măsură a proprietăților dielectrice și pentru spectroscopie de microunde.

Laboratoare nou create

- L1. Procesarea și Analiza Structurilor Supramoleculare
- L2. Microscopie de Scanare: Scanning Tunneling Microscopy (STM) și Atomic Force Microscopy (AFM)
- L3. Procesarea Sistemelor Moleculare cu Pulsuri Laser Ultracurte (femtosecunde)

Laboratoare modernizate

- L4. Modelare Moleculară și Simulări Numerice
- L5. Sinteza și Analiză Chimică / Biochimică
 - Sinteza de Molecule Organice
 - Analiză Fizico - Chimică
 - Biochimie
- L6. Spectroscopie RMN
- L7. Difrakție de Raze X
- L8. Spectroscopie Vibrațională: Dicroism Circular și Raman
- L9. Spectroscopie și Calorimetrie Fototermică
- L10. Tehnici de Microunde și Aplicații

Condiții speciale de procesare a probelor

prin construirea unui sistem de tratare a aerului la puritate înaltă dedicat procesării și analizei structurilor supramoleculare



Instalație de Epitaxie prin Fascicul Molecular cuplat cu STM în Clean Room 2.

În cadrul proiectului MDFMOLBIO infrastructura Laboratorului de Procesare și Analiză a Structurilor Supramoleculare a fost completat cu un sistem integrat de condiționare a aerului, cerut de experimente specifice care necesită condiții de curățenie controlate. Lucrările de realizare a camerei curate s-au derulat în anul 2011.



Dr. Nicoleta Toșa, Fiz. Alia Ungurean și Dr. Peter Göransson în timpul trainingului pentru Eitre®3 Nanoimprint system în CR1.

Camera curată (CR) este compusă din două spații de lucru conform standardului internațional ISO 14644-1:1999: CR1-ISO 5 și CR2-ISO 8, un spațiu anexă pentru echipamentele ce deservește aparatele din CR1 și CR2, și un vestiar situat la intrarea în CR2. Trecurile între încăperi se fac numai între clase de curățenie consecutive. Compartimentările pentru delimitarea unităților create sunt din materiale specifice conform ISO 14644-4:2001. Suprafețele (pereți, uși, geamuri, tavane) sunt netede, lucioase și îndeplinesc cerința obligatorie de non-emisie, nonretenție.

Stația centrală de climatizare și tratare a aerului asigură pretratarea aerului care este transportat la unitățile filtrante și apoi la grilele de introducere a aerului montate în tavanul camerei curate. Unitățile filtrante cu ventilație sunt dotate cu trepte de filtrare cu filtre HEPA H13, montate în tavanul fals al camerei curate și care asigură aerul tratat conform claselor de curățenie solicitate. Introducerea aerului în încăperi se realizează prin intermediul difuzoarelor de plafon cu filtre HEPA, asigurând o curgere laminară. Recircularea aerului este realizată cu ajutorul grilelor de evacuare din pereții camerei curate și implică un aport de aer proaspăt. Unitățile camerei curate sunt destinate fabricării și caracterizării de structuri supramoleculare, depuneri de straturi subțiri și nanoimprimare în condiții controlate de curățenie.



Echipamentul pentru nanoimprint în CR1.

În camera curată au fost instalate următoarele echipamente: Instalație de Epitaxie prin Fascicul Molecular cuplat cu STM, Echipament integrat de tip Molecular Ink-Print, în CR2, iar în CR1 Echipament de nanoimprimare și instalația de depunere/tratament termic al straturilor subțiri (CR1).

Laborator de Procesare și Analiză a Structurilor Supramoleculare

A fost construit un sistem integrat pentru tratarea și climatizarea aerului, specific camerelor curate, având următoarea configurație:

Cameră curată (CR) cu o suprafață totală de circa 58 m²:

Cameră curată ISO-5, clasa 100 (CR1), suprafața utilă de 10 m²

Cameră curată ISO-8, clasa 100000 (CR2), suprafața utilă de 28 m²

Spațiu anexă S = 6 m²

Vestiar (SAS) cu o suprafață de 7.5 m²

Amenajarea spațiului:

Pardoseala: covor cu pori sigilați, armat cu fibră de sticlă, antistatic, antiacid și dezinfectabil

Pereți, uși, vitraje și tavane false casetate specifice camerelor curate

Unități filtrante (HEPA H13) cu ventilație și trepte de filtrare: 5–10% în CR2 și 70–100% în CR1

Mobilier specific din metal, ceramică și polipropilenă

Centrală de climatizare și tratare a aerului (CTA):

Automatizare completă

Amplasată în exterior

Alimentată cu agent apă caldă (70°C) și apă rece (7–12°C).

Construcție compactă cu compresoare încorporate, cu unitate de răcire externă și 2 trepte de filtrare

Putere motor ventilator: maximum 3.5 KW, trifazat 400 V, 50 Hz

Parametri aer condiționat:

Debit aer recirculat: 4000 m³/h

Umiditate: 40 ± 10%

Temperatură: 22 ± 2°C

Presiune relativă: 0+++ în CR1, 0+ în CR2, 0 în SAS

Dimensiune particule filtrate: 0.3 μm

Laborator de Procesare și Analiză a Structurilor Supramoleculare

Instalația de Epitaxie Moleculară oferă posibilitatea depunerii în vid înaintat, prin tehnica de epitaxie moleculară, a straturilor subțiri din diverse materiale, cum ar fi: metale, semiconductori, oxizi, molecule organice.

Principalele componente și performanțe tehnice sunt:

Camera de depunere cilindrică cu diametrul de 254 mm prevăzută cu șapte porturi pentru șapte celule de efuzie

Actualmente echipată cu trei celule de efuzie, dintre care una pentru Ga, una pentru Au și una pentru materiale organice

Camera de introducere a probei (Fast Entry Chamber) cu un manipulator pentru probă

Sistemul RHEED (Refraction High Energy Electron Diffraction) pentru monitorizarea procesului de epitaxie moleculară. Este compus din sursa de electroni cu „beam blanking”, ecran cu port de vizualizare, shutter, camera CCD, computer.

Elipsometru spectroscopic pentru măsuratori *in situ* destinat aplicațiilor pe filme subțiri. Efectuează măsurători de grosimi a filmelor depuse, constantele optice (n,k), depolarizarea, „optical band gap”. Domeniul spectral: 450-1000 nm

Sistemul de vid este compus dintr-o pompă fără ulei cu debit de 4m³/h, pompă turbomoleculară cu debit de 260 l/s, pompă ionică cu debit de 230 l/s și pompă cu sublimare de titan cu debit de 1000 l/s. Presiunea minimă asigurată: 1 x 10⁻¹⁰ mbar



Sistem *Lab-10 MBE*

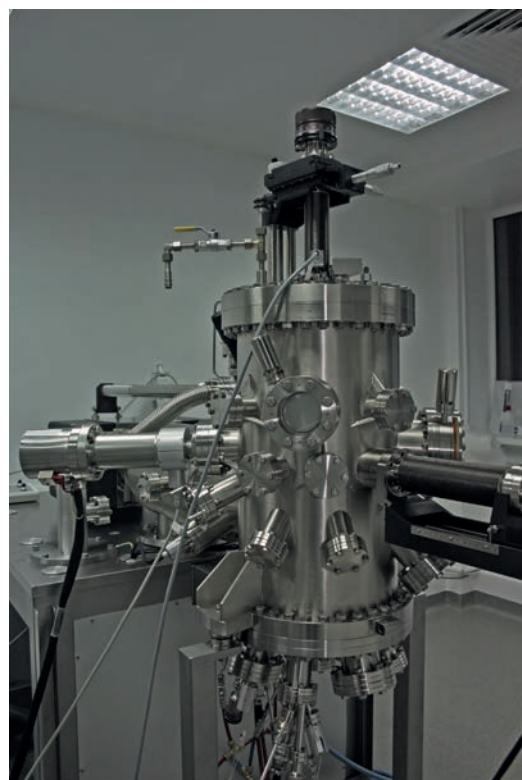
echipament ultraperformant
pentru depunere de
filme subțiri epitaxiale

Prin proiectul MDFMOLBIO, Laboratorul de Procesare și Analiză a Structurilor Supramoleculare a fost completat cu o Instalație de Epitaxie prin Fascicul Molecular. Echipamentul este modelul *LAB-10 MBE System* produs de Omicron (Germania), a fost instalat la începutul anului 2012 și este operat de către personal de cercetare cu înaltă calificare.

Sistemul este conceput pentru a îndeplini cele mai ridicate și stricte cerințe pentru depunerile de straturi subțiri moderne. Este potrivit pentru aproape orice aplicație, cum ar fi depunerea de metale, semiconductori, materiale magnetice, straturi oxidice sau molecule organice. Datorită designului său modular și flexibil, sistemul *MBE LAB-10* poate fi oricând upgradat cu gama de sisteme de analiză Multiprobe Omicron fără nici o dificultate. De altfel, sistemul nostru urmează a fi cuplat cu un Microscop de scanare prin tehnici AFM și STM, echipament ce a fost și el contractat în cadrul proiectului MDFMOLBIO și care va fi instalat în curând. Astfel, probele ce urmează a fi fabricate în condiții de vid înalt vor putea beneficia, imediat după fabricare, de o analiză AFM sau STM fără a părăsi condițiile de vid.

Cu ajutorul acestui sistem urmărim dezvoltarea de aplicații ale sistemelor moleculare autostructurate, cu arhitectură și funcționalitate controlată, fabricate prin autoasamblare pe baza proceselor de recunoaștere moleculară.

Se vor fabrica dublu-straturi nanometrice ce conțin receptori selecționați și care se autoasamblează pe diferite micro/nano rețele de suprafață (polimeri, aur, siliciu). Prelucrarea ulterioară a unor astfel de nanomateriale funcționalizate bazate pe recunoaștere moleculară și metodologii gazdă-oaspete, împreună cu platforme substrat suficient de flexibile și de robuste mecanic, au un potențial mare pentru aplicații cum ar fi separarea de nanoparticule, senzori, transportul medicamentelor la locul țintă etc.



Sistem integrat dedicat tehnologiei de nanoimprimare

pentru electronică moleculară de înaltă performanță



Dr. Bogdan Cozar echipat pentru experimente în CR1.

Unul dintre echipamentele de nanofabricație achiziționate în cadrul proiectului MDFMOLBIO este destinat litografiei de nanoimprimare (NIL), în momentul de față fiind unicat la nivel național. Datorită tehnologiei patentate *Soft Press®*, a dimensiunii caracteristice minime < 20 nm, și a unui strat minim rezidual < 15 nm, acest sistem are o gamă largă de aplicații: de la circuite integrate, dispozitive optoelectronice și fotovoltaice, suporturi magnetice de stocare, la nanobiosenzori utilizați în nanomedicină. Echipamentul NIL a fost instalat în octombrie 2012 și este operat de personal de înaltă calificare.

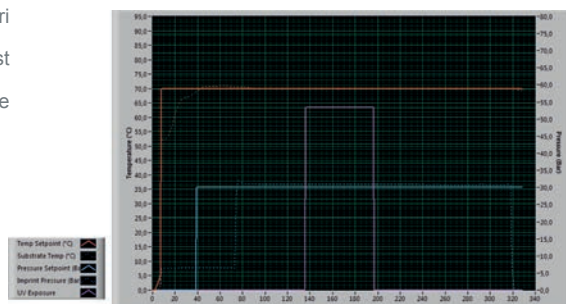
Această tehnologie este relativ recentă, are randament ridicat și înaltă rezoluție în multiplele aplicații. Noi vom urmări replicarea modelelor dintr-o matriță într-un polimer termoplastic sau care poate fi tratat în UV.

În acest moment, un subiect de mare actualitate în lumea științifică este fabricarea de nano- și microdispozitive, cu randament foarte bun și costuri mici. Această tehnologie îmbină cu succes costurile, calitatea rezultatelor și precizia. Viitorul circuitelor integrate semiconductoare va fi puternic influențat de apariția dispozitivelor produse prin nanoimprimare.

Un alt domeniu de interes pentru noi este dezvoltarea de biosenzori și de sisteme microelectromecanice (MEMS), unde NIL poate fi folosită cu succes datorită capacității de a imobiliza biomolecule în structuri bine ordonate care își păstrează funcționalitatea.

Suprafețele inscripționate prin tehnologia NIL oferă locuri preferate pentru atașarea, migrarea și asamblarea celulelor în sisteme funcționale.

Metodele de imprimare permit fabricarea directă a unei varietăți de forme cu diferite proprietăți fizico-chimice, fiind în același timp metode accesibile pentru cercetare. Tehnicile litografice de imprimare permit fabricația de structuri cu o rezoluție de 20 nm sau mai bună, imprimarea de structuri 2D și 3D, structurarea și modificarea de materiale funcționale, cu utilizare în cercetarea pentru dezvoltare de noi dispozitive.



Evoluția parametrilor experimentali în timpul unui proces de imprimare UV-NIL.



Dr. Alia Ungurean operând la Eitre® 3.

Laborator de Procesare și Analiză a Structurilor Supramoleculare

Echipamentul integrat destinat tehnologiei de nanoimprimare este alcătuit din două loturi independente:

Sistemul de nanoimprimare propriu-zis *Eitre® 3 Nanoimprint Lithography System* (Obducat)

Sistemul de tratare în plasmă FEMTO plasma cleaner (Diener electronic GmbH + Co. KG)

Sistemul de imprimare *Eitre® 3* este capabil de imprimare pe cale termică, prin iradiere cu radiație UV și imprimare simultană (termic și iradiere cu UV).

Echipamentul este instalat în camera curată de clasă 100.

Dimensiunea maximă a substratului/matriței: 77 mm în diametru (3")

Presiunea de imprimare este rezultată prin comprimarea aerului: 1-70 bar

Temperatura de imprimare poate să atingă valori până la 200°C

Modulul UV: lampa de mercur emite în intervalul standard de lungimi de undă (250-400 nm)

Sistemul FEMTO de tratare în plasmă este conectat la sistemul de imprimare *Eitre® 3*. Prin utilizarea unui flux de ioni reactivi este îndepărtat stratul rezidual format în urma procesului de nanoimprimare.

Datorită fluxului redus de ventilație din camera de vid, împrăștierea probelor de mici dimensiuni va fi evitată.

Controlul proceselor în plasmă este realizat cu ajutorul unui detector optic: modificarea culorii plasmei în albastru deschis când este detectat stratul de fotorezist, urmată de ardere în culoare violet.

Laborator de Procesare și Analiză a Structurilor Supramoleculare

Sistem Desktop DPN 5000 de
Nanofabricație

NanoInk a dezvoltat tehnologia de
inscripționare cu cerneluri
moleculare DPN 5000 cu control
standard și echipament integrat
pentru aplicații tehnologice de
nanofabricație prin tehnici AFM.
Specificațiile tehnice standard ale
sistemului DPN 5000:

Scanner DPN personalizat
Software InkCAD™ versiune 4.0
Imagistică LFM & AFM
Sistem optic DPN performant
Unitate de control DPN: Linux
Controler Camera de Mediu

Sistemul DPN 5000 are integrate
următoarele opțiuni de utilizare

Librărie cerneluri moleculare
personalizată
Kit printare nano 2D
Kit cerneluri moleculare active
Moduri de imagistică AFM
Pachet suport aplicații
Pachet service extins

NanoInk a proiectat un scanner
personalizat pentru DPN, care
permite o compatibilitate cu o
gamă largă de geometrii de
cantilever, reflectivități sau scrieri
cu cerneluri moleculare.

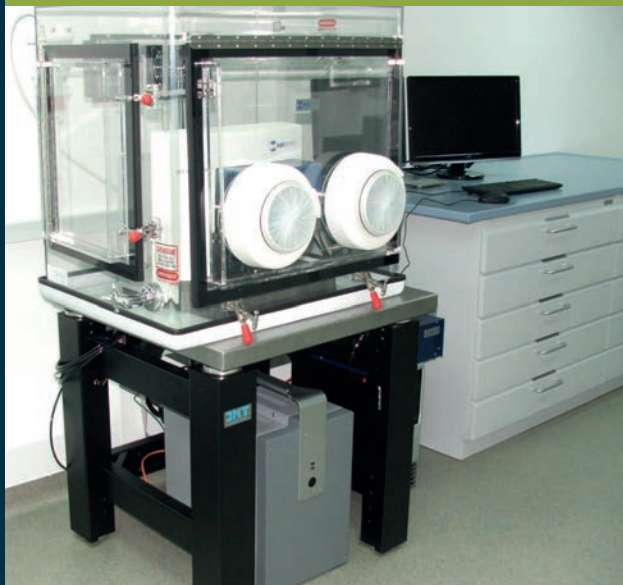
Caracteristicile relevante includ:

Compatibilitate cu protocoalele
de scriere 1D&2D
Control maxim al scrierii prin
ajustarea fotodetectorului cu
suma semnalului comutatorului
Funcționare în mod laser extins
pentru potrivirea cu geometriile
multiple ale cantileverelor
Focus laser reglabil până
la 2 mm

O cameră de mediu a fost
integrată în sistemul DPN 5000.

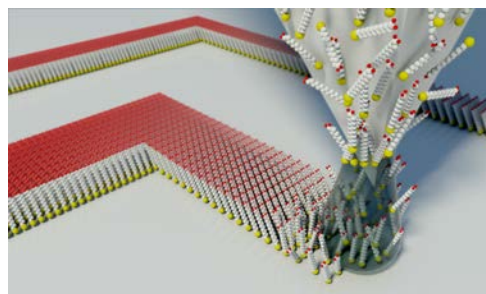
Astfel sunt controlate condițiile de
mediu în timpul experimentelor:

Senzorii de temperatură și
umiditate monitorizează mediul
incintei de depunere în timp
real, iar ambii parametri sunt
monitorizați de controlerul PID
integrat.



Nanotehnologia implică construirea de componente
active la scară nanometrică, de preferință prin
tehnici de tip "bottom-up". Metoda de
nanolitografiere prin DPN folosește în procesele de
inscripționare o astfel de tehnică, combinând
capabilități de scriere versatilă la scară nano cu
imagistică AFM de înaltă performanță.

Cu o suită completă de sisteme micro-electro-
mecanice (MEMs) integrate în dispozitivele de
livrare a cernelurilor moleculare, utilizatorii pot
începe crearea de nanostructuri imediat după
instalare.



Reprezentare schematică a unui proces DPN [sursa:
<http://www.nanoink.net/technology.html>].

Procesul de inscripționare DPN are avantajul unic
de a oferi o metodă directă pentru scrierea cu
diverse specii moleculare pe o suprafață într-un
experiment unic. Mai mult decât atât,
inscripționarea selectivă a acestor molecule în
locații bine definite pe suprafață poate crea
nanostructuri particulare sau chiar structuri
specifice unor dispozitive mai mari. O astfel de
tehnică oferă posibilități numeroase și incitante în
domeniul tehnologiilor moleculare.

Nanofabricație prin tehnici "bottom-up" bazate pe microscopie de forță atomică

tehnologie de
inscripționare moleculară
NSCRIPTOR DPN

Punctele forte ale acestei tehnologii sunt:

1. Inscripționarea directă a materialelor pe
domenii bine definite și cu precizie la scară
nanometrică.
2. Generarea de structuri flexibile.
3. Generarea de structuri multi-component de
ordinul micronilor sau sub-micron.

Aplicațiile DPN 5000 includ:

Șabloane de nano-afinitate

Inscripționări de structuri la scară nanometrică
care pot direcționa legătura și orientarea altor
materiale, dezvoltând noi tehnologii
moleculare.

Scriere de structuri în stare solidă

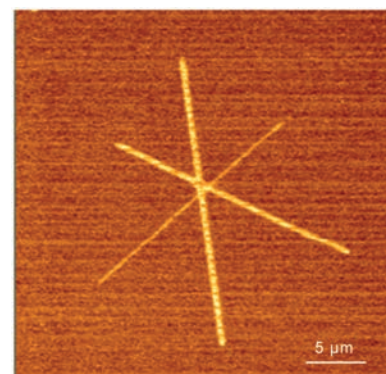
Depozitare directă de tip "etch resists" pentru
a crea structuri nanometrice de orice material
pe orice substrat.

BioNano

Utilizarea DPN pentru a crea structuri
personalizate de biomolecule.

Plasare directă

Decorarea structurilor existente folosind DPN
pentru aplicații electronice moleculare.



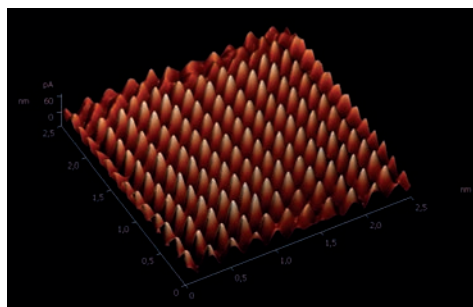
Acid 16-Mercaptohexadecanoic (MHA) depus
pe substrat de aur.

Cercetare interdisciplinară la scară nanometrică: AFM, Raman confocal, TERS

integrarea SPM cu
microspectroscopia Raman
confocală

Laboratorul nou creat include, de asemenea, o platformă *NTEGRA Spectra* (NT-MDT), achiziționată și pusă în funcțiune la sfârșitul anului 2011. Echipamentul integrează Microscopul de Forță Atomică (AFM) și spectrometrul Raman confocal *SOLAR TII*; pot fi efectuate aproape toate modurile AFM existente, furnizând informație vastă privitoare la proprietățile fizice ale probei studiate, cu rezoluție nanometrică, iar simultan poate fi precizată compoziția chimică a probei prin spectroscopia confocală Raman. Măsurătorile pot fi efectuate în prin excitație laser în configurație directă și în configurație inversată. În fiecare punct al probei este înregistrat spectrul Raman complet, fiind prelucrat ulterior cu softul de achiziție și prelucrare de date integrat. Echipamentul este optimizat pentru Tip Enhanced Raman Spectroscopy (TERS).

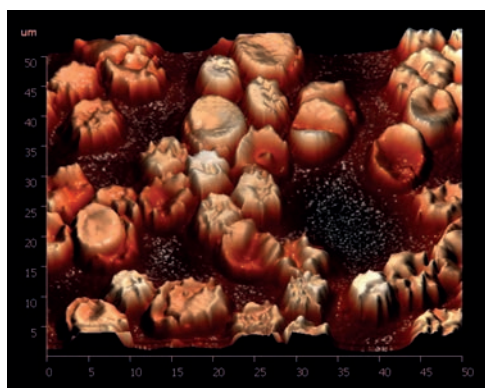
Datorită simplității și potențialului său de investigare, AFM a devenit la ora actuală unul dintre instrumentele indispensabile pentru nanotehnologie. Acesta are un avantaj major, și anume acela că aproape toate tipurile de probe pot fi investigate, de la foarte dure, cum ar fi suprafețe ale materialelor ceramice sau dispersii de nanoparticule metalice, sau foarte moale, de pildă polimeri extrem de flexibili, celule umane sau molecule de ADN individuale. Un microscop de forță atomică ne permite, de exemplu, să obținem imagini care ilustrează



Imagine STM a HOPG. Mod curent constant. Aria de scanare: 2.5 x 2.5 nm². Bias 0.1 V, FB 0.01. Ac 80:20 Pt/Ir.



aranjamentul atomilor individuali într-o probă sau structura moleculelor individuale. Alături de capacitățile sale de imagistică, AFM are diverse moduri spectroscopice prin care pot fi determinate și alte proprietăți la scară nanoscopică, iar amplificarea puternică a câmpului electromagnetic în proximitatea asperităților metalice nanometrice (nanoantene) completează aceste informații cu spectre TER.



Topografie AFM a unei probe de hematit, măsurată în mod semicontact, în aer. Cantilever NSG03-A. Aria de scanare 50 x 50 μm².

Utilizând un vârf AFM special modificat, metalizat cu Au/Ag (*Quorum 150R S*), intensitatea semnalului Raman provenind de la un spot nanometric perfect localizat pe suprafață este multiplicată cu câteva ordine de mărime. Pentru a păstra un echilibru optim între intensitatea maximă a semnalului și penetrarea minimă în probă, platforma instalată la INCDTIM a fost configurată cu trei laseri.



Sistem de depunere Quorum Q150R S

Laborator de Microscopie de Scanare a Suprafețelor

Platforma *NTEGRA Spectra*

îmbină un Spectrometru Raman
confocal cuplat cu un Microscop
de Forță Atomică

Configurații:

Directă: pentru experimente
simultane AFM - Raman TERS
pentru probe opace; obiectiv
100x (NA 0.7)

Inversată: optimizată pentru
experimente simultane AFM -
Raman - TERS pentru probe pe
substrat transparent; Microscop
Olympus IX71, obiectiv cu
imersie în ulei (NA 1.3)

Modalități de scanare: cu vârful
sau cu proba

Măsurători în aer, lichide, medii
gazoase, vid (0.5×10^{-2} Torr)

Celulă QCM (*Quartz Crystal
Microbalance*), celulă închisă
pentru măsurători în lichid

Scannere interschimbabile:
100x100x10 μm și 1x1x1 μm

Operare *stand alone*

Sunt disponibile majoritatea
modurilor AFM

Aer și vid: contact;
semi-contact; non-contact,
Microscopie de Forță Laterală
(LFM), Imagistica Rezistenței
Electrice (SRI), Microscopie prin
Modularea Forței (FMM),
Microscopie de răspuns Piezo
(PFM), Imagistică de fază,
Microscopie de Forțe Magnetice
(MFM), Microscopie de Forțe
Electrostatice (EFM),
Microscopie de Scanare a
Capacității (SCM), Microscopie
Kelvin Probe (SKM),
Spectroscopie AFM,
Microscopia Forțelor de
Adeziune, Litografie AFM (forță
și voltaj); STM/STS

Lichid: contact, semi-contact,
LFM, FMM, Imagistică de fază,
Spectroscopie AFM

Achiziție de date și procesarea
imaginilor: NOVA software

Spectrometru Raman *SOLAR TII*

Lasere: 532 nm, 632.8 nm, 785 nm

filtru Rayleigh 90 cm⁻¹

Rezoluție spectrală: < 0.22 cm⁻¹

(532 nm), < 0.1 cm⁻¹ (785 nm)

Rezoluție spațială: < 200 nm

(XY), 500 nm (Z)

4 rețele de difracție: 150, 600,

1800 ls/mm, Echelle (rezoluție

spectrală < 0.1 cm⁻¹)

Deteție: cameră CCD

Sistem de izolare la vibrații: masă
optică *NEWPORT RS4000*

Laborator Microscopie de Scanare a Suprafețelor

Microscop de scanare STM și
AFM în vid ultra înalt și
temperaturi joase

Echipamentul este destinat
obținerii de imagini cu rezoluție
atomică prin tehnici de
microscopie prin efect tunel
(STM), precum și microscopie de
forță atomică de tip "tuning fork"
și cu cantilever, la temperaturi
variabile între 50K și 650K, în
condiții de vid ultra înalt (UHV).
Microscopul de scanare este
compus din:

Instalație de vid ultra înalt
pentru introducere, preparare
și analiza suprafeței probei,
care conține: camera de
preparare și analiză a suprafeței
probei, de formă sferică cu
diametrul intern de 220 mm;
camera de introducere a probei
(Fast Entry Chamber);
manipulator pentru probă

Sistem SPM (Scanning Probe
Microscopy) de vid ultra înalt la
temperatură variabilă, care
conține: camera SPM pentru
modulele STM și AFM; modul
STM; modul AFM cu cantilever;
modul AFM tip "tuning fork"

Sistem de pompe pentru
asigurarea vidului

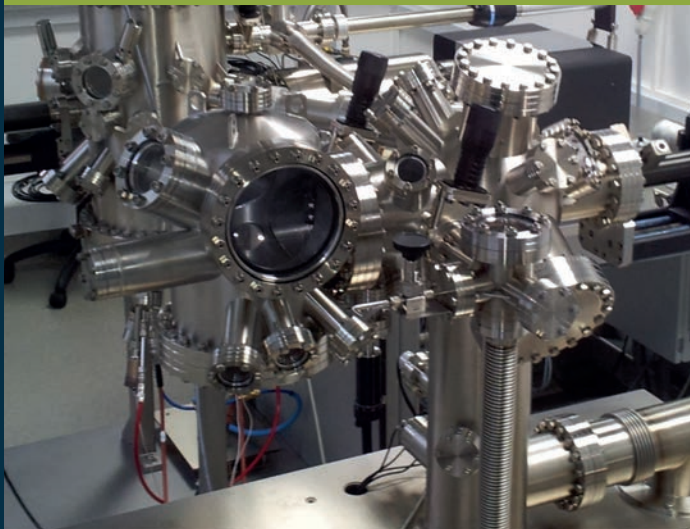
Sistem de încălzire pentru
degazare

Unitate de control SPM

Sistem de transfer direct al
probei din camera MBE în
camera SPM

Modul de pregătire vârfuri STM
cuplat la camera SPM

Sistemul poate realiza imagini
STM și AFM noncontact, de tip
"tuning fork", precum și STS
(spectroscopie de tunelare cu
scanare) simultan, pe aceeași
zonă a probei



Microscopie de Scanare cu Rezoluție Atomică

echipamentul cu cea mai
recentă tehnică de scanare în
vid ultra înalt

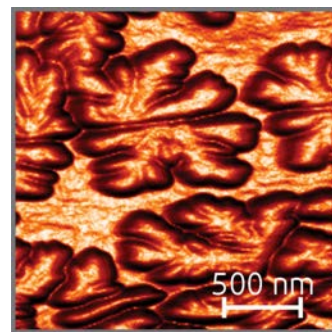
Unul din echipamentele de cercetare achiziționate în
cadru proiectului MDFMOLBIO este un microscop de
scanare în condiții de vid ultra înalt ce oferă tehnologii
de scanare de tipul STM (Scanning Tunneling
Microscopy) și AFM (Atomic Force Microscopy) într-o
gamă de temperatură de la 50K până la 650K.

Instalația este produsă de firma *Omicron* din Germania
și urmează a fi instalată și cuplată la sistemul de
depunere în vid prin epitaxie moleculară, ce a fost
fabricat de același producător și care a fost deja instalat
în primăvara acestui an. Cuplarea celor două instalații
prezintă avantajul de a putea investiga probele imediat
ce acestea au fost fabricate în instalația de epitaxie
moleculară, fără ca acestea să părăsească mediul de
vid ultra înalt.

Pe lângă tehnicile de scanare clasice de tipul AFM și
STM, microscopul de scanare beneficiază de o tehnică
AFM de tipul non-contact, denumită Qplus AFM, ce
reprezintă cea mai recentă inovație a firmei Omicron în
materie de AFM. Această tehnică utilizează un vârf de
scanare metalic, deci conductor, ce oferă posibilitatea
realizării simultane atât a unei imagini de tipul AFM
clasice, cu informații despre topografia probei studiate,
cât și a unei imagini de tipul STM, ce oferă informații
despre proprietățile electrice ale acesteia. Interacțiunea
dintre vârf și probă este una de tipul non-contact ce
determină frecvența de rezonanță a diapazonului din
cuarț pe care este montat vârful, acest din urmă
parametru fiind cel folosit pentru a controla și menține
distanța dintre vârf și probă la valori foarte mici.

Amplitudinea de vibrație foarte mică a diapazonului
permite obținerea unor imagini AFM cu un raport
semnal/zgomot foarte mare, fapt ce este deosebit de
util, în special pentru măsurătorile la temperatură joasă,
unde se pot obține imagini de o rezoluție deosebită.

Acest echipament de cercetare, care este unic în
România, este un instrument esențial pentru una din
principalele direcții de cercetare din Departamentul de
Fizică Moleculară și Biomoleculară, și anume studiul
straturilor unimoleculare autoasamblate și a diverselor
molecule sau paternuri moleculare funcționalizate care
sunt așezate pe acestea.



Imagine AFM non-contact a cristalelor
de Sb oxidate pe HOPG [Prin amabili-
tatea Dr. B. Kaiser, TU Darmstadt,
Germania; <http://www.omicron.de>].



Dinamica sistemelor moleculare în domeniul femtosecundelor

un sistem laser integrat destinat explorării dinamicii moleculare și interacției laser-materie

Proiectul MDFMOLBIO a inclus și achiziția unui sistem complex pentru investigarea experimentală a dinamicii sistemelor moleculare în interacție cu pulsuri laser. Pulsurile cu durată între 30 și 200 fs ($1 \text{ fs} = 10^{-15} \text{ s}$) sunt emise cu o frecvență de repetiție de până la 200 kHz în domeniul de lungimi de undă de la 200 la 2000 nm. Laserul poate pompa un generator de armonici (a doua, a treia sau a patra, selectabile) și două amplificatoare optice parametrice.

Această sursă flexibilă de radiație poate emite două sau trei pulsuri de frecvențe diferite cu întârziere controlată între ele. Combinația de pulsuri se utilizează în două spectrometre, de absorbție și de fluorescență, care fac parte integrantă din sistem. Rezoluția temporală este la nivel de picosecunde.

Cele două spectrometre vor fi folosite în aplicații de spectroscopie rezolvată în timp, fotochimie, fotofizică, fotobiologie și în studii din domeniul științei materialelor și fizica polimerilor și a semiconductorilor.

Laserul are putere suficientă să poată induce procese neliniare în medii lichide sau solide, deci poate fi folosit la micro- și nanofabricație, generarea de rețele de difracție și ghiduri de undă, polimerizare multifotonică și diverse aplicații biomedicale.

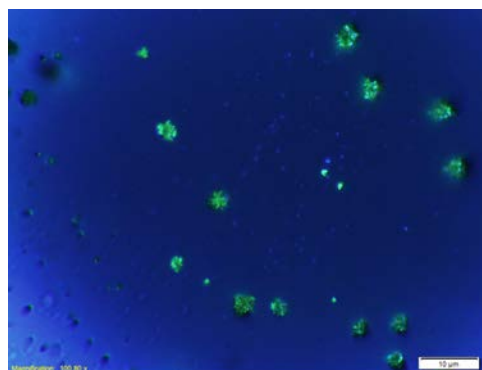
Pentru aplicațiile din domeniul fotolitografiei și fabricației cu laser avem în dotare un microscop inversat echipat pentru microscopie de super-rezoluție și cu un sistem XYZ de poziționare cu precizie de 1 nm. Cu acesta sunt posibile investigații de imagistică și microscopie de înaltă rezoluție.



Întregul sistem laser este sub control computerizat, cu instrumentație pentru măsurarea duratei, energiei, lungimii de undă și frecvenței de repetiție a pulsurilor. Configurarea experimentelor de absorbție și fluorescență și procesarea spectrelor achiziționate se realizează cu softuri dedicate.



Imagine de fluorescență a cristalelor de carbazol excitate cu radiație laser. Dimensiunea cristalitelor: 330-395 nm. Mărire 100X.



Imagine postiradiere a unui polimer dopat cu Pt pe substrat de sticlă. Mărire 160X.

Laborator de Procesare a Sistemelor Moleculare cu Pulsuri Laser Ultracurte

Sursa laser

Frecvența de emisie:
1028 $\pm$ 5 nm
Putere > 6 W @10-200 kHz
Durată puls (FWHM) < 200 fs
Energie puls >1.0 mJ @1-5 kHz
Frecvența de repetiție pulsuri:
de la single pulse la 200 kHz

Generator armonica a doua (SH), a treia (TH) și a patra (FH)

Eficiență conversie: SH >30%,
TH >30%, FH >8%

Amplificator parametric (colinar)

Domeniul de lucru:
630-1020 nm și 1040-2600 nm
Domeniul extins cu armonica a patra: 210-255 nm și 260-315 nm
Eficiență conversie >14%
Lărgime de bandă 120-220 cm^{-1}
Durata pulsului 120-200 fs

Amplificator parametric (necolinar)

Domeniul de lucru 650-900 nm
Durata pulsului < 30 fs

Spectrometru de absorbție dependentă de timp

Rată achiziție spectre:
1-2000 Hz
Domeniul de lucru 480-1100 nm
Rezoluție temporală < 280 fs
Rezoluție spectrală < 1.5 nm
Linie standard delay 1.7 ns

Spectrometru de fluorescență

Configurație Up-conversion

Domeniul de lucru 400-1600 nm
Rezoluție spectrală 100 cm^{-1}
Linie standard delay 3.4 ns cu pas de 33.3 fs
Rezoluție temporală < 300 fs

Configurație Time Correlated Single Photon Counting

Domeniul de lucru 185-820 nm
Rezoluție temporală standard: < 200 ps
Rezoluție temporală <1.2 ns

Microscop inversat echipat cu:

Intrări multiple pentru camera CCD de înaltă rezoluție
Iluminare laser sau prin fluorescență; Obiective cu apertură numerică mare
Sistem piezo de nanopозиționare XYZ a substratului de înaltă precizie (pas minim 1 nm)

Laborator de Difracție de Raze X

A fost achiziționat un difractometru de raze X *SuperNova* cu lungime de undă duală, și cu următoarele specificații tehnice:

Tub

Mo/Cu, 50 kV, 0.8 mA

Microsursa de Mo: până la de 2.5x mai intens decât un tub de Mo standard, cu optică mono-capilară

Microsursa de Cu: până la de 3x mai intens decât un tub cu anod rotitor

Detector CCD de tip EOS

Cip CCD: *Kodak KAF4320-E*

Material scintilator: Gadox

Răcire Peltier : -40°C (răcire în trei etape)

Stabilitatea temperaturii: $\pm 0.05^{\circ}\text{C}$ (micro-processor PID)

Zgomot (așa numit zgomot de citire) $< 10 \text{ e}^- \text{ RMS}$

Curent de întinerire: $< 0.05 \text{ e}^-/\text{pix.s}$

Timp de citire (ciclu complet, citire cip, CDS, conversie analog-digital, transfer detector - PC, stocare pe disc):
0.28 s (4 x 4 mod de *binning*)
0.46 s (2 x 2 mod de *binning*)
1.59 s (1 x 1 mod de *binning*)

Aria activă: 95 mm diagonală

Dimensiunea pixelului de pe scintilator: 31 μm

Reducerea fibrei optice: 1.3 (mică)

Geometrie Kappa cu patru cercuri

Sfera Omega, Kappa, Phi coincidentă: 10 μm

Rezoluție: 0.00125° pentru Omega și Theta, 0.0025° pentru Kappa și 0.005° pentru Phi

Viteză de scanare: între 0.005 și $3.0^{\circ}/\text{s}$

Raza unghiulară a detectorului de scintilație: -115 la 157°

Distanța de la CCD la probă: între 45 mm și 150 mm (depinde de detector)

Timp de răspuns: 3 ms



Cristaliografie de raze X de înaltă performanță

utilizând un difractometru de raze X cu microsursă duală

În cadrul proiectului MDFMOLBIO, Laboratorul de Difracție de Raze X a fost echipat cu un difractometru de tip *SuperNova*. Acest difractometru de ultimă generație are în dotare 2 microsurse: de Cu, și respectiv de Mo, foarte intense și un detector CCD de înaltă performanță.

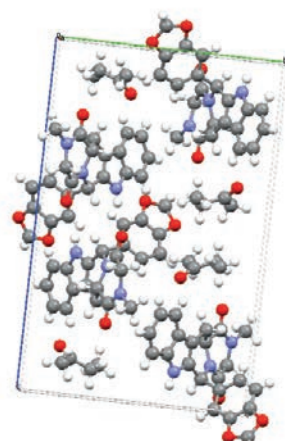
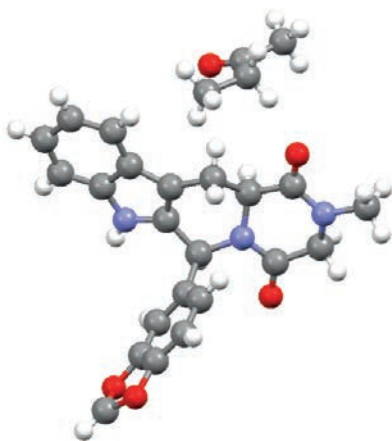
Prezența celor 2 microsurse, ușor de comutat, extinde aria investigațiilor pentru o largă clasă de materiale: organice, anorganice, organo-metalice. Cu acest difractometru se pot investiga atât molecule mici, cât și macromolecule. Difractometrul este echipat cu un Cryojet HT cu domeniul de temperatură cuprins între 90 și 490 K.

Achiziția difractometrului *SuperNova* a extins posibilitatea investigațiilor în Laboratorul de Difracție de Raze X atât pe pulberi, cât și pe monocristale.

Mai mult, Laboratorul de Difracție de Raze X a devenit o parte importantă în fluxul de investigații implementat în cadrul proiectului HT-PHARMA (POS CCE 536), având ca tematică studiul compușilor farmaceutici.

Deși difractometrul *SuperNova* a fost instalat în anul 2011, s-au determinat deja un număr mare de structuri cristaline. Dintre aceste structuri cristaline, merită să menționăm pe cele obținute din compuși farmaceutici (polimorfi, hidrați, solvați, săruri și co-cristale), produși naturali și compuși organo-metalici.

Laboratorul de Difracție de Raze X a devenit o parte integrantă în diferite arii de cercetare care includ și tineri cercetători.



Tadalafil 2-butanone solvate: molecules (left) and elementary cell.

Cele mai sofisticate experimente RMN pe solide accesibile la INCDTIM Cluj

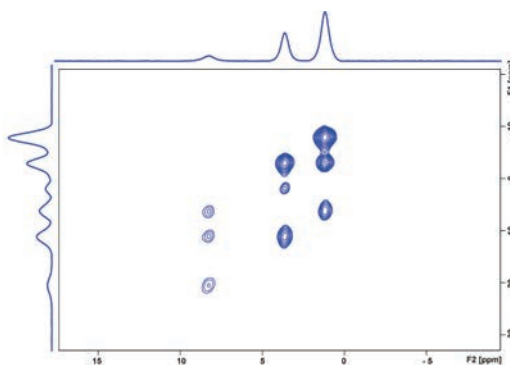
prin achiziționarea unui spectrometru bazat pe ultimele tehnologii în domeniu



Infrastructura de cercetare a Laboratorului RMN a fost completată prin intermediul proiectului MDFMOLBIO cu un spectrometru RMN pe solide (RMN-s) de ultimă generație. Acest echipament este unicat în țară, fiind primul spectrometru complet dedicat aplicațiilor de înaltă putere pe solide: este dotat cu un magnet supraconductor de tip *wide-bore* și încorporează tehnologia *ultra-fast MAS* (Magic Angle Spinning), recent introdusă în domeniu. Prin noua achiziție a fost creată o facilitate RMN modernă care să permită noi dezvoltări într-un domeniu de cercetare cu tradiție la INCDTIM Cluj.

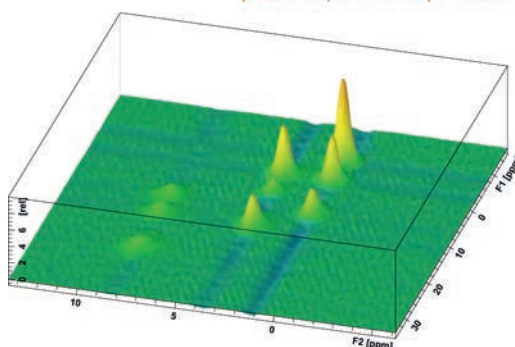
Spectrometrul RMN-s a fost instalat la sfârșitul anului 2011, fiind operat de o echipă de cercetători cu înaltă calificare în domeniu. Acest echipament este esențial pentru creșterea potențialului de cercetare a Laboratorului RMN, care are rezultate notabile în dezvoltarea de metode RMN-s avansate. Noua infrastructură va contribui la creșterea impactului pe care spectroscopia RMN-s îl va avea în comunitatea științifică românească, pentru utilizatori din domenii precum biologia structurală, cristalografia RMN, chimia supramoleculară și a materialelor avansate, unde această tehnică este intens folosită pentru investigarea structurii, funcționalității și a interacțiunilor la nivel molecular. De noul echipament pot beneficia sectoarele chimic și farmaceutic în producția de materiale "inteligente" și dezvoltarea de noi medicamente. Laboratorul RMN oferă de asemenea oportunități de formare pentru tinerii cercetători.

Spectrometrul RMN-s achiziționat este configurat pentru un domeniu larg de aplicații practice: pot fi investigate o gamă foarte largă de specii nucleare active RMN (^1H , ^{13}C , ^{15}N , ^2H , ^{31}P , ^{23}Na , ^{17}O , ^{29}Si , ^{43}Ca , ^{27}Al , ^{25}Mg etc.), probe organice sau anorganice, probe cu diferite morfologii (de la materiale policristaline, polimeri, geluri, zeoliți, etc., la morfologii complexe cum ar fi materialele compozite, peptide încorporate în membrane, suprafețe funcționalizate la nivel nano- sau micrometric etc.)



Ultra-Fast Magic Angle Spinning (MAS)

o tehnologie revolutionara pentru imbunatatirea rezolutiei in spectroscopia ^1H RMN pe solide



Laborator de Rezonanță Magnetică Nucleară (RMN)

A fost achiziționat un spectrometru RMN pe solide (RMN-s) Bruker Avance III, având următoarea configurație / specificații tehnice:

Magnet supraconductor de 11.76 T (500 MHz), ultra-ecranat, de tip *wide-bore*

Consolă RMN cu trei canale de radio-frecvență (*rf*) pentru aplicații de putere înaltă, specifice solidelor

Sistem de generare a pulsurilor de ultimă generație, cu o rezoluție în timp de 12.5 ns

Precizie în setarea fazei unui puls $rf < 0.01^\circ$, iar a frecvenței < 0.005 Hz; timpul necesar modificării frecvenței, fazei sau amplitudinii unui puls este de 25 ns

Receptor de radiofrecvență cu o lărgime de bandă minimă de 5 MHz, echipat cu unitate de control pentru acumularea semnalului RMN cu filtrare digitală în timp real și tehnologie de supraeșantionare.

Unitate de microimagică pentru aplicații în știința materialelor

Spectrometrul este echipat cu diverse capuri de probă pentru RMN-s, microimagică și difuzie

Cap de probă CP/MAS de tip *ultra-fast*, rotoare de 1.3 mm, frecvența maximă de rotire a probei de 67 kHz: ideal pentru experimente RMN-s de rezoluție înaltă pe ^1H

Cap de probă CP/MAS pe trei canale, rotoare de 2.5 mm, frecvența de rotație maximă de 35 kHz: ideal pentru experimente pe (bio)solide marcate izotopic

Cap de probă CP/MAS standard ^{15}N - ^{31}P / ^1H , rotoare de 4 mm, frecvența de rotație maximă de 15 kHz: potrivit pentru aplicații de rutină pe solide organice

Cap de probă compatibil cu sistemul de gradienti MICRO 2.5, intensitate maximă 2.5 G/cm/A

Cap de probă pentru difuzie pe direcția Z, DIFF30, cu 30 G/cm/A

Laborator de Chimie și Biochimie

O instalație complexă de tratare a probelor în câmp de microunde a fost achiziționată de la *Anton Paar*, având următoarea configurație/ performanțe tehnice:

Cuptor monomodal *Microwave 300* pentru procese în vase închise, la scară redusă:

Un magnetron, putere instalată 850 W, regim nepulsatoriu, presiune max. 30 mbar, temperatura max. 300°C, agitare magnetică până la 1200 rpm, sistem pneumatic de închidere a vaselor de reacție cu volume de 0.5-20 ml, controlul temperaturii prin senzori IR și fibră optică cu cristal de rubin

Cuptor multimodal *Synthos 3000* pentru procese în vase închise, la scară mare:

Două magnetroane, putere instalată 1400 W, regim nepulsatoriu, presiune max. 80 mbar, temperatura max. 400°C, agitare magnetică până la 3 rpm, senzor IR de temperatură și sondă cu imersie în vasul de referință, vase închise din PTFE și cuarț masiv de 100 ml

Echipament complex dedicat experimentelor de fizică, chimie și biochimie:

Coloană cu banda de Teflon rotitoare pentru distilarea fracționată:

Coloană de distilare cu jachetă vidată și bandă de teflon rotitoare cu viteză de până la 2500 rpm

Concentrații de alcool mai mari decât 93% (m/m). Control digital al separatorului de vapori

Aparatură pentru prepararea și prelucrarea probelor:

Nișă chimică cu suprafața protectoare din polipropilenă și volum de exhaustare a aerului de 1000 m³/h, etuvă la 30-300°C, balanțe analitice cu rezoluție de 0.01 mg /0.015 mg repetabilitate, pH-metru și conductometru de înaltă precizie (Mettler), agitatoare magnetice cu încălzire, sistem UV pentru iradiere la 254/365 nm

Echipament laborator biochimie:

Hotă sterilă, incubator, distilator pentru apă ultrapură, omogenizator ultrasonic



Facilități de mare complexitate pentru sinteză și preparare de probe

prin achiziționarea de aparatură pentru prepararea probelor în experimente din domeniul fizicii, chimiei și biochimiei

În cadrul proiectului MDFMOLBIO infrastructura laboratorului de chimie și biochimie a fost completată cu aparatură de mare complexitate dedicată sintezei și preparării de probe.

Sistemul integrat de tratare a probelor în câmp de microunde de la *Anton Paar* este utilizat pentru procese de sinteză, extracție și digestie caracterizate prin rapiditate, eficiență și reproductibilitate. La momentul actual acest sistem este cel mai performant sub aspectul controlului și al condițiilor de securitate în manipulare.

Microwave 300 este utilizat pentru procesarea de probe la scară mică, în vase închise sub presiune, și optimizare. Construcția cavității monomodale asigură o concentrare a liniilor de câmp, care permite încălzirea eficientă la temperaturi înalte chiar și a solvenților sau pulberilor cu absorbție scăzută, utilizând tehnologia carburii de siliciu. Este destinat cu precădere sintezei organice asistate în câmp de microunde, dar este foarte eficient și pentru procesele de extracție.

Synthos 3000 este utilizat ca reactor multimodal pentru procese standard la scară mare, precum și pentru aplicații speciale, greu de realizat prin metode convenționale. Regimul de lucru permite încălzirea uniformă de la valori scăzute ale energiei până la valori foarte ridicate de temperatură și presiune, cu menținerea simultană a parametrilor. Sistemul unic de răcire reduce timpul total de proces și previne reacțiile secundare, furnizând rezultate deosebite și reproductibile. Diferitele tipuri de rotoare și vase de reacție aferente, precum și accesorii sofisticate recomandă *Synthos 3000* ca pe un sistem de înaltă performanță în laboratoarele de procesare a materialelor.

Coloana cu bandă de teflon rotitoare este utilizată pentru separarea etanolului din vin, necesar pentru determinarea concentrației de deuteriu (D) prin tehnici RMN. Analizele sunt folosite în scopul autentificării vinurilor, folosind raporturile izotopice (D/H) din etanol. Metoda se referă la determinarea abundenței naturale de deuteriu în etanolul separat din vin, pe baza căruia se stabilește proveniența geografică și posibila falsificare a vinurilor.

Aparatura dedicată laboratorului de chimie și biochimie este utilizată pentru sinteza în condiții convenționale, prelucrarea amestecurilor de reacție, investigarea și caracterizarea compușilor, condiționarea de probe pentru experimente de biochimie și din domenii conexe.



Instalația de distilare cu bandă de teflon rotitoare.

Laborator de Modelare Moleculară și Simulări Numerice

Echipamentul de calcul al laboratorului a fost completat cu stații de lucru de înaltă performanță pentru simulări numerice și modelări moleculare.

A fost achiziționat un cluster IBM System x iDataPlex dx360 M4, având următoarele date tehnice principale:

File Server for Storage: General Parallel File System (GPFS)

Storage: 20TB with SAS 2.0 disks and 10000 rpm

Two Head Node Servers: CISCx86 6-core, with 2.93 GHz, 12 MB L3 cache

26 Nodes: Two Intel Xeon Sandy Bridge E5-2665 8-Core 2.4 GHz, 20 MB L3 cache, DDR3 64 GB, 1600 MHz ECC (416 cores)

2 Nodes: Two Intel Xeon Sandy Bridge E5-2665 8-Core 2.4 GHz, 20 MB L3 cache, DDR3 64 GB, 1600 MHz ECC + NVIDIA Tesla M2090 GPU (32 cores)

Network Connection: FDR InfiniBand, 56 GB bandwidth

În vederea unei utilizări optime a clusterului de calcul intensiv au fost achiziționate ultimele versiuni ale celor mai utilizate programe de calcul specializate în:

Chimie cuantică:

Gaussian 09 C01



Molpro 2012.1

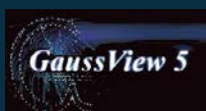


Dinamică Moleculară:

Amber 12

Grafică moleculară:

GaussView 5



Simularea proprietăților fizice și chimice ale materiei este unul din domeniile cele mai dinamice ale științei actuale, oferind un spectru larg de oportunități pentru tinerii cercetători. Odată cu dezvoltarea teoriei funcționalei de densitate, instrumentele teoretice în acest domeniu au evoluat exploziv, permițând astăzi studiul *ab initio* al unor modele ce includ mii de atomi.

Achiziția clusterului HPC are potențialul de a impulsiona proiectele în desfășurare în cadrul departamentului, dar și de a deschide noi domenii de cercetare.

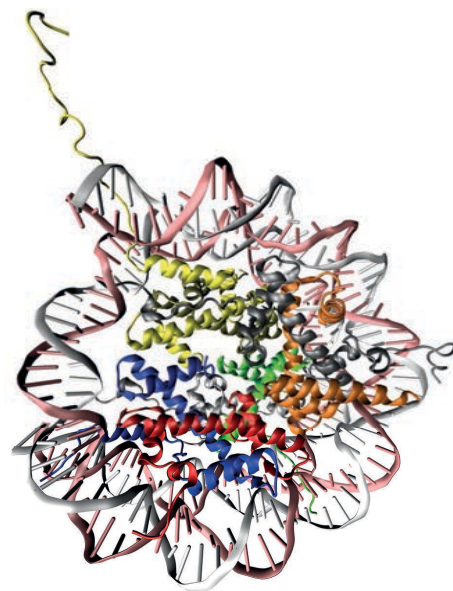
Printre aplicațiile vizate menționăm:

- (I) design de structuri moleculare, cu aplicații în industria farmaceutică; design de materiale pentru conversia eficientă a energiei termice în energie electrică;
- (ii) studiul structurii și dinamicii moleculei de ADN și a componentelor sale;
- (iii) electronică moleculară și alte aplicații potențiale ale sistemelor moleculare în tehnologia informației.

Pe termen scurt, obiectivul nostru este de a integra într-o structură unitară rezultatele simulărilor numerice și cele ale investigațiilor experimentale. Acest obiectiv impune utilizarea unei puteri de calcul mult superioară celei deja disponibile. Tehnologia InfiniBand pe care se bazează clusterul HPC permite utilizarea intensivă a algoritmilor paraleli în simularea numerică.

Caracterizare și design de noi funcționalități la scară moleculară

prin achiziția clusterului de calcul intensiv



Prin utilizarea intensivă a beneficiilor aduse de paralelizarea masivă a aplicațiilor software, ne propunem să proiectăm experimente concrete pe baza unor date numerice precise, ceea ce va conduce la o creștere a eficienței de exploatare a infrastructurii experimentale. Consecința acestor dezvoltări va fi creșterea calității outputului științific al departamentului în următorii ani.



Laboratorul de Spectroscopie și Calorimetrie Fototermică

O nouă cameră termografică model SC7200 a fost achiziționată, având următoarele caracteristici tehnice:

O matrice de 320 X 256 detectori de InSb (răspuns spectral în intervalul 1.5-5.1 μm , dimensiune 30 μm /detector), cu o sensibilitate termică de 25 mK/DL, frecvență maximă de achiziție de 178 Hz (full frame) și un sistem de răcire Stirling având durata de funcționare de 8000 h

Rata de achiziție ajustabilă până la o frecvență de 1172 Hz (pentru o matrice de 64*8 detectori) pentru monitorizarea unor evenimente termice rapide

Sistem de declanșare automată (external triggering) permițând sincronizarea imaginii cu semnale externe

Sistem de filtre inserat între lentilă și planul focal permițând obținerea unor imagini la lungimi de undă fixe

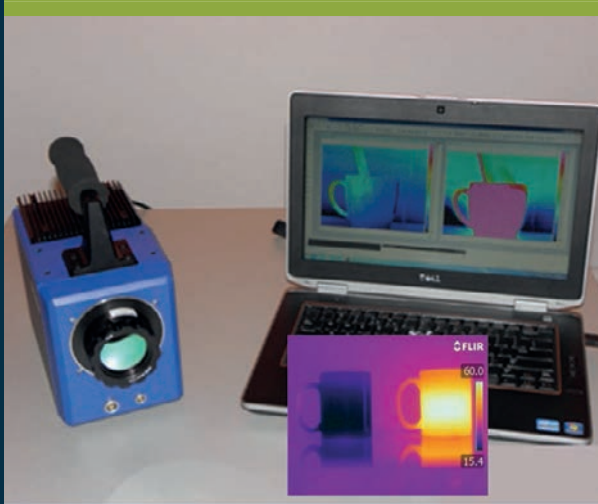
Sistem automat pentru corecția de neuniformitate a pixelilor

Sistem de achiziție tip lock-in care măsoară amplitudinea și faza semnalului termic la frecvența externă de excitație și care permite îmbunătățirea rezoluției spațiale a imaginii IR

Un obiectiv de 50 mm (distanța focală 0.5 m, câmp vizual 9 x 7.7 cm) și un altul de tip G1 (mărire 1:1, distanța focală 30 cm, câmp vizual 9.6 x 7.7 mm) care oferă o rezoluție de 30 μm /pixel

Fișiere de calibrare pentru ambele obiective, operând în intervalul de temperatură 5-300°C

Software dedicat vizualizării imaginilor termice, achiziției imaginilor în timp real, achiziției imaginilor în regim de detecție sincronă sau studiului analizelor de solicitare mecanică



Descrierea temei de cercetare

Camera termografică model FLIR SC7200 furnizează imagini termice de înaltă calitate (variații de temperatură sub 20 mK, rezoluție spațială 30 μm /pixel), fiind echipată cu un software performant dedicat înregistrării și analizării imaginilor înregistrate. Această cameră este un instrument precis și util pentru soluționarea unor probleme științifice variate din domenii diverse, cum sunt:

Caracterizarea termo-fizică a materialelor

Termografia IR permite determinarea parametrilor termici dinamici (difuzivitate și efuzivitate termică) ai diferitelor materiale aflate în stare solidă. În general, acești parametri pot fi măsurați în condiții tranzitorii impunând un flux de căldură (modulat sau flash) pe suprafața unui material și urmărind în timp evoluția temperaturii cu camera. Acești parametri pot fi utilizați ca indicatori în determinarea gradului de umiditate al clădirilor, studiul proceselor de polimerizare, caracterizarea termică a semiconducătorilor, a izolatoarelor termici etc.

Sănătate

Termografia IR este o tehnică de investigare non-invazivă datorită faptului că subiectul investigat

Cameră termografică digitală de înaltă rezoluție

analize termice cu aplicații în domeniile științific, industrial și medical

nu este supus radiațiilor nocive. Abaterea de la normalitate a temperaturii la nivelul pielii poate oferi indicații ale unor afecțiuni locale, cum ar fi leziunile pretumorale sau varice. Monitorizarea termoreglării pielii este astfel foarte utilă pentru depistarea timpurie a acestor afecțiuni.

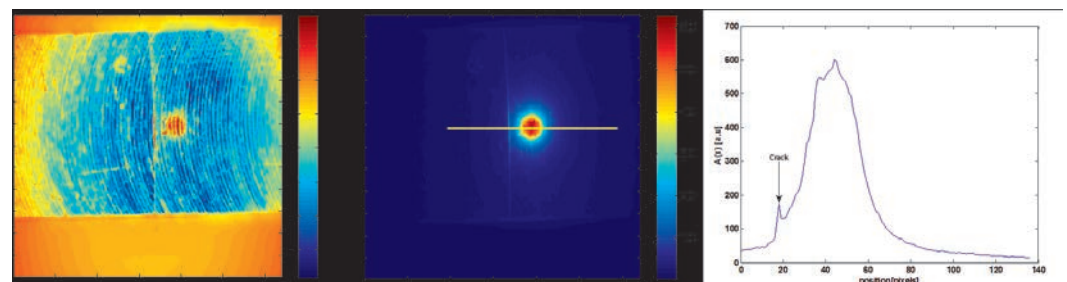
Agricultură

Imagistica termică poate fi adoptată cu succes în studiul fiziologiei plantelor sau în urmărirea proceselor de coacere sau deteriorare ale fructelor și legumelor.

Controlul nedistructiv al materialelor

Analizând anomaliile în distribuția căldurii pe suprafață cauzate de prezența unui defect sau a unei discontinuități, pot fi detectate fisuri, delaminări sau incluziuni în diferite materiale de interes industrial (metale, compozite etc.)

Camera a fost pusă în funcțiune în luna septembrie 2012, ea permițând creșterea competitivității activităților de cercetare viitoare desfășurate în cadrul laboratorului.



Imaginea continuă, imaginea amplitudinii și profilul amplitudinii peste o fisură liniară.

O nouă metodă spectroscopică pentru determinarea structurilor biomoleculare

abordări noi în determinarea configurației absolute a moleculelor chirale

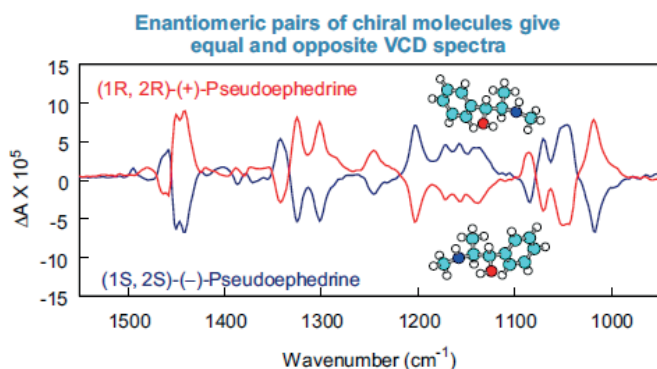
Prin achiziționarea Spectrometrului pentru Dicroism Circular Vibrațional, infrastructura Departamentului de Fizică Moleculară și Biomoleculară a fost îmbunătățită cu unul dintre cele mai valoroase echipamente, capabil să caracterizeze proprietățile moleculelor chirale. Spectrometrul VCD poate fi folosit pentru mai multe tipuri de analize referitoare la structura și conformațiile moleculelor organice. Spectrometrul a fost instalat în iulie 2012, fiind operat de personal de cercetare cu înaltă calificare.

Asimetria moleculară joacă un rol fundamental în determinarea activității chimice, respectiv biologice. Exemplele cele mai cunoscute sunt nucleotidele și aminoacizii. Alte exemple care includ un număr mare de compuși acționează atât ca medicamente, cât și ca toxine, având uneori consecințe dramatice. Prin urmare, cunoașterea configurației absolute a moleculelor chirale este esențială în chimie, biologie și farmacologie.

În termeni descriptivi, Dicroismul Circular Vibrațional (VCD) este cuplajul activității optice la spectroscopia vibrațională în infraroșu.

Concret, spectrele VCD indică diferența spectrelor vibraționale ale radiației circular polarizate (stânga și dreapta). Esența VCD constă în combinarea stereochemiei activității optice naturale cu spectroscopia vibrațională. Spectrometrul pentru dicroismul circular vibrațional este utilizat din ce în ce mai mult în determinarea configurației absolute a moleculelor optic active. Datele VCD obținute, împreună cu datele IR și susținute prin metode teoretice permit determinarea conformației stereochemice a moleculelor. Dintre cele mai importante aplicații se pot menționa: determinarea configurației absolute, analizele conformaționale în stare lichidă (molecule mici, biomolecule: peptide, proteine, ADN/ARN, zaharuri) și determinarea excesului enantiomeric.

Abordarea bazată pe cunoaștere în aplicații farmaceutice și chimice, cum ar fi rational drug design și producția de materiale inteligente pot beneficia de asemenea de noul echipament.



Btools.com/docs/Biotools_Catalog.pdf

Laborator de Spectroscopie Vibrațională

Spectrometrul pentru Dicroism Circular Vibrațional *ChiralIR-2X™* cu următoarele caracteristici tehnice principale:

Spectrometru FT-IR

Interferometru corner-cube;
domeniul spectral:
6500 - 800 cm⁻¹

Sursă de radiație IR de tip dual cu raport semnal/zgomot (S/N) îmbunătățit de ~ 3.6 ori față de un sistem cu o singură sursă

Detector MCT cu fereastră de ZnSe răcit cu azot lichid

Rezoluție spectrală: 32 - 1 cm⁻¹

Spectrometrul VCD

Modulator fotoelastic PEM - 37 kHz AR - element activ din ZnSe cu suprafață tratată anti-reflexie

Domeniul spectral modulat 4000 - 850 cm⁻¹ (nu necesită schimbarea filtrelor)

Deviația liniei de bază < 2 × 10⁻⁵ unități de absorbanță la o acumulare de 20 min în domeniul spectral 850-1800 cm⁻¹

Zgomotul < 8 × 10⁻⁶ unități ΔA la o acumulare de 20 min la rezoluție spectrală de 4 cm⁻¹ în domeniul spectral 850 - 1800 cm⁻¹

Calibrarea și alinierea optică este intrinsecă spectrometrului

Atuuri principale

Spectrometrul este dotat cu un sistem *SyncRoCell™*, sistem DSP patentat și sistem de termostatare a celulelor de măsură

SyncRoCell™ – sistem rotativ al celulei de măsură necesar eliminării artefactelor cauzate de aceasta și care poate fi folosit pentru măsurători FT-IR și VCD pentru probe lichide și solide

Spectrometrul VCD *ChiralIR-2X™* este echipat cu sistem DSP (digital time-sampling) care permite extragerea simultană a semnalelor modulate (AC) și a semnalelor IR (DC) și asigură posibilitatea de a acoperi întreg domeniul spectral 4000 - 850 cm⁻¹ într-o singură măsurătoare

Sistem de termostatare a celulelor prin efect Peltier de măsură: domeniul de temperatură -4 - +90°C, cu precizie ±0.3°C

Laborator Aplicații Tehnici de Microunde

Sistem de proiectare și realizare
pentru prototipuri electronice de
microunde:

1. Ploter CNC LPKF Protomat S62

0.25 μ m rezoluție
0.2 mm diametrul minim al
găurii
0.125 mm traseul cel mai fin
62.000 rpm motor freză
Schimbare automată 10 scule
Proces frezare 2.5 D
Recunoaștere fiducială
Software: LPKF CircuitCam și
LPKF BoardMaster

2. Presa hidraulică LPKF MultiPress-S

Profile programabile de
presiune, temperatură, timp
280 N/cm² presiune max.
250°C temperatură max.
Durata presării cca. 90 min

3. Proces de mascare LPKF Promask, UV expoz

Durata mascării cca. 60 min
Proces în patru etape
Expunere și dezvoltare UV
Rezoluție globală: min. 0.2 mm

4. Sistem semi-automat de poziționare Essemtech Expert

Amplasare componente BGA și
Fine-Pitch (0.4 mm)
Sistem video cu cameră
Software de control SA-Control

5. Cuptor pentru lipire LPKF Protoflow-N2

Proces de lipire prin Reflow
Programarea și înregistrarea
profilului de temperatură pentru
reflow sau mascare
Fișier de temperaturi compatibil
Microsoft Excel

6. Baie de cuprare LPKF Minicontac-RS

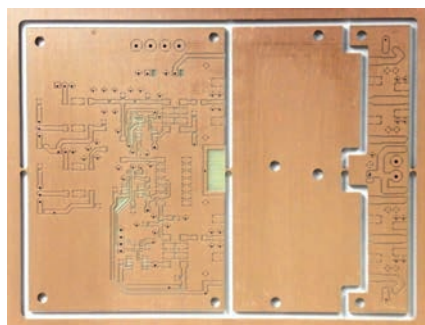
Sistem Reverse Pulse Plating
Băi de curățare, activare cu
grafit, depunere electrochimică
Diametrul minim pentru gaurile
de trecere 0.2 mm
Poate procesa max. 4 straturi



Linie de fabricație PCB pentru prototipuri

de la concept la
realizare practică

Linia de realizare a circuitelor imprimate Printed Circuit Board (PCB) permite obținerea prototipurilor de microunde și electronice, având destinația exclusivă pentru cercetare, în 24 de ore (două straturi) sau 72 de ore (multistrat) după ce procesul de proiectare s-a finalizat.



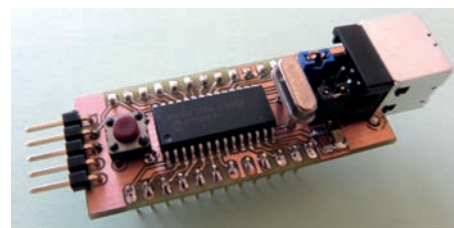
Aspectul circuitului imprimat la terminarea procesului de frezare și tăiere.

Geometria precisă cerută de prototipurile de radiofrecvență (RF) și de microunde este realizată prin Control Numeric asistat de Calculator (CNC), utilizând microfreză de degajare din carburi de înaltă calitate prin frezare cu turație ridicată. Plăcile de circuit imprimat cu până la patru straturi sunt realizabile pentru orice tip de material FR4, incluzând mascare de culoare verde prin procedeul de fotolitografie cu expunere în ultraviolet (UV) și acoperire chimică a suprafeței expuse.



Antena microstrip cu fante în timpul procesului de frezare pe ploterul LPKF Protomat S62.

Procesul de metalizare pentru găurile de trecere având diametrul minim 0.2 mm (grosimea materialului 1.6 mm) utilizează tehnologia de depunere cu puls de curent inversat. Astfel se obține un strat cu grosime uniformă. Plăcile electronice pot fi echipate cu componente cu lipire pe suprafață (SMD), printr-un proces de aplicare manuală a pastei de lipit și de poziționare semiautomată. O cameră video de înaltă rezoluție permite vizualizarea întregului proces. Se poate realiza repararea circuitelor gata fabricate sau modificarea cablajelor nepopulate utilizând fie dispozitivul cu aer cald inclus în echipamentul Essemtech Expert, fie cuptorul pentru lipire cu temperatură programabilă Protoflow-N2. O echipă de profesioniști vă oferă consultanță în domeniu, ca proiectele dumneavoastră să prindă viață. Experiența noastră include tehnica digitală, sisteme încorporate, electronică analogică și de înaltă frecvență.



Sistem încorporat cu microcontroler PIC18F2550 pentru aplicații de dezvoltare cu interfață USB.



Prototipul unui amplificator RF de putere (915 MHz) cu două canale de 60 W, pentru uz științific (diatermie în câmp de microunde).

Aplicații ale interacției microundelor cu substanța

sistem de măsură a proprietăților dielectrice și spectroscopie de microunde în domeniul de frecvențe 10 kHz - 325 GHz

Sistemul de măsură a proprietăților dielectrice și de absorbție în domeniul de microunde 0-325 GHz urmărește dobândirea de cunoștințe fundamentale în domeniul de interacție a microundelor cu substanța, având ca scop:

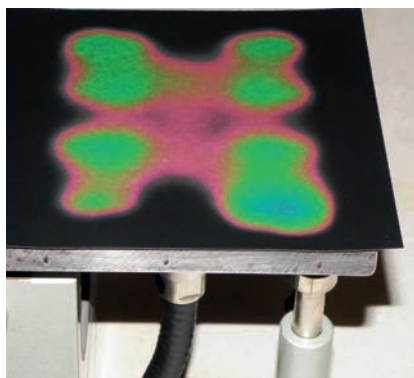
Cercetări fundamentale privind mecanismele de interacție a microundelor în sisteme biologice complexe: unde genetice, efectele absorbției microundelor în sisteme celulare.

Metode noi de caracterizare și procesare a sistemelor moleculare și biomoleculare complexe.

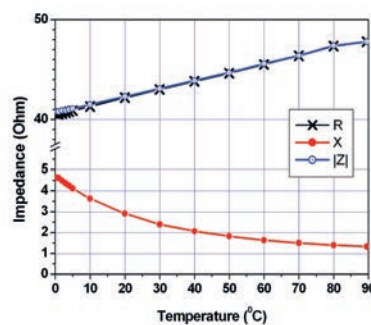
Realizarea de tratamente neconvenționale în câmp de microunde pe putere, pentru obținerea de materiale noi, compozite, metamateriale, tehnologii de tratament economice, bază de date de rețete de tratament.

Traductori neinvazivi pentru caracterizarea unor procese moleculare și biomoleculare.

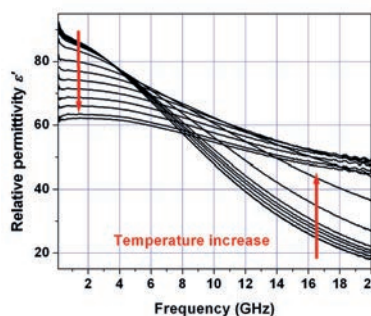
Metode biologice de avertizare și reducere a poluării electromagnetice.



Distribuție de putere/temperatură pe suprafața unei antene fantă (cu 8 fante) utilizată ca aplicator medical.



Impedanța apei în funcție de temperatură la frecvența de 2.462 GHz.



Variația permitivității relative ϵ' a apei în funcție de temperatură în domeniul 1-90°C.

Această arie tematică se bazează pe caracterul selectiv al absorbției de microunde în substanță, în funcție de proprietățile dielectrice ale speciilor moleculare vizate, pe transferul direct în probă al energiei de microunde și pe caracterul neinvaziv al interacției.

Importanța domeniului de cercetare este conturată și de programele de cercetare în domeniu aflate în derulare în țară în ultimii cinci ani, dintre care trei sunt conduse de colectivul nostru (unul dintre ele în derulare). Aceste direcții de cercetare se regăsesc și în tematicile programelor europene FP7, EMF-NET, COST-BM0704 sau de cooperare bilaterală.

Laborator Aplicații Tehnici de Microunde

SISTEM DE MICROUNDE

1. Generator de microunde *Agilent PSG analog signal generator E8257D*

Domeniu de frecvență:
250 KHz - 325 GHz
Putere de emisie maximă între
3 μ W (-25 dBm) și 150 mW
(+22 dBm)

2. Powermetru de microunde *Agilent U2000H*

Domeniu de frecvență:
10 MHz - 18GHz

Domeniu de putere: 10 nW -
1 W (-50 dBm la +30 dBm)

Atenuator extern până la 500 W

3. Analizor de spectru *Agilent E4448A PSA* cu principalele caracteristici:

Domeniu de frecvență de bază:
3 Hz - 325 GHz

Zgomot lateral în banda video
la 10 kHz mai bun de
-118 dBc/Hz

Nivel de zgomot mediu al
amplitudinii cu preamplificator la
RBW de 1 Hz, în mod FFT, între
-140 dBm și -165 dBm, în
domeniu de frecvență de bază

4. Analizor vectorial de rețea *Agilent N5227A PNA*

Domeniu de frecvență:
10 MHz - 110 GHz

Nivel de putere: mai mare de
-20 dBm în tot domeniul de
frecvență (10 MHz - 110 GHz)

Gama dinamică: > 70 dB pentru
orice frecvență de lucru, în
domeniul 50 MHz-110 GHz

Nivel de zgomot: < -90 dB
pentru orice frecvență de lucru
în domeniul 50 MHz - 110 GHz

Modernizabil cu module
externe la 1 THz

Echipa

SISTEME MOLECULARE AUTOASAMBLATE

Dr. Ioan TURCU

Dr. Mihaela MIC

Dr. Nicoleta TOȘA

Dr. Bogdan COZAR

Dr. Adrian CALBOREAN

Dr. Silvia NEAMȚU

Tehn. Ana SACALIȘ

NANOFABRICAȚIE

Dr. Radu BRĂTFĂLEAN

Dr. Bogdan COZAR

Dr. Nicoleta TOȘA

Dr. Adrian CALBOREAN

Dr. Daniel MARCONI

Drd. Alia UNGUREAN

MICROSCOPIE DE SCANARE A SUPRAFEȚELOR

Dr. Diana BOGDAN

Dr. Bogdan COZAR

SISTEM LASER FEMTOSECUNDE

Dr. Valer TOȘA

Dr. Nicoleta TOȘA

Dr. Katalin KOVÁCS

Ing. Călin HOJBOTĂ

LABORATOR DE CHIMIE ȘI BIOCHIMIE

Dr. Nicoleta TOȘA

Dr. Silvia NEAMȚU

Dr. Mihaela MIC

Dr. Adrian PÎRNĂU

Tehn. Ana SACALIȘ

Tehn. Carmen BUGEAC

SPECTROSCOPIE ȘI CALORIMETRIE FOTOTERMICĂ

Dr. Nicolae DĂDĂRLAT

Dr. Mihaela STREZA

Dr. Mircea POP

Tehn. Marcel BOJAN

TEHNICI DE MICROUNDE – APLICAȚII

Dr. Emanoil SURDUCAN

Dr. Camelia NEAMȚU

Dr. Vasile SURDUCAN

Dr. Cristian TUDORAN

Echipa de Management MDFMOLBIO

Director de proiect:

Dr. Ioan Turcu

Coordonator proiect:

Dr. Radu Brătfălean

Responsabil achiziții:

Ing. Dumitru Chincișan

Responsabil economico-financiar:

Ec. Diana Nicoară

Responsabil informare și publicitate:

Dr. Diana Bogdan

RMN solide

Dr. Claudiu FILIP

Dr. Xenia FILIP

Dr. Carmen TRIPON

RMN lichide

Dr. Mircea BOGDAN

Dr. Călin FLOARE

Dr. Adrian PÎRNĂU

Tehn. Carmen BUGEAC

ANALIZE STRUCTURALE PE SOLIDE

Dr. Claudiu FILIP

Dr. Xenia FILIP

Dr. Carmen TRIPON

Dr. Ioana GROSU

Dr. Flavia MARTIN

Dr. Marieta MUREȘAN-POP

Drd. Maria MICLĂUȘ

CRISTALIZARE ȘI POLIMORFISM

Dr. Mihaela POP

Dr. Ioana GROSU

Dr. Flavia MARTIN

Dr. Marieta MUREȘAN-POP

Drd. Maria MICLĂUȘ

DIFRAȚIE DE RAZE X

Dr. Gheorghe BORODI

Drd. Maria MICLĂUȘ

MODELĂRI NUMERICE

Dr. Valer TOȘA

Dr. Cristina MUNTEAN

Dr. Attila BENDE

Dr. Daniel BÎLC

Dr. Cristian MORARI

Dr. Diana BOGDAN

Dr. Katalin KOVÁCS

Ing. Călin HOJBOTĂ

Dr. Luiza BUIAGĂ-IARINCA

Contact:

Institutul Național de Cercetare-Dezvoltare
pentru Tehnologii Izotopice și Moleculare
INCDTIM

Str. Donath, nr. 65-103

400293 Cluj-Napoca

Tel.: (+40) 264 584 037

Fax: (+40) 264 420 042

E-mail: itim@itim-cj.ro

www.itim-cj.ro/mdfmolbio



INCDTIM este singurul institut național de cercetare-dezvoltare din Regiunea Nord-Vest, ocupând o poziție importantă între cele mai semnificative institute de cercetare din România. Institutul deține o infrastructură de cercetare la standarde europene, oferind un mediu profesional celor care aspiră la o carieră de cercetare în fizică.



Data publicării: Decembrie 2012

Editor: Departamentul de Fizică Moleculară și Biomoleculară, INCDTIM



Institutul Național de Cercetare-Dezvoltare pentru
Tehnologii Izotopice și Moleculare INCDTIM

Str. Donath nr. 65-103, 400293 Cluj-Napoca
Tel.: +4(0)264.58.40.37
Fax: +4(0)264.42.00.42
www.itim-cj.ro
E-mail: itim@itim-cj.ro



TITLUL PROIECTULUI: MODERNIZAREA DEPARTAMENTULUI DE FIZICĂ MOLECULARĂ ȘI BIOMOLECULARĂ
MDFMOLBIO
www.itim-cj.ro/mdfmbio/index.html
ID 2 PM / 1 / 07.10.2008

BENEFICIAR: INSTITUTUL NAȚIONAL DE CERCETARE-DEZVOLTARE PENTRU
TEHNOLOGII IZOTOPE ȘI MOLECULARE INCDTIM CLUJ-NAPOCA

VALOAREA INVESTIȚIEI: 30 034 930 LEI

EVALUARE: Aria tematică a proiectului: Materiale, produse și procese inovative
Codul UNESCO al proiectului: 2206
PROGRAM OPERAȚIONAL SECTORIAL CREȘTEREA COMPETITIVITĂȚII ECONOMICE (POS CCE)
Axa Prioritară AP 2: CREȘTEREA COMPETITIVITĂȚII ECONOMICE PRIN CERCETARE-
DEZVOLTARE ȘI INOVARE
Domeniul de intervenție D 2.2: Investiții în infrastructura de CDI și dezvoltarea capacității administrative
Operațiunea O 2.2.1: Dezvoltarea infrastructurii CD existente și crearea de noi infrastructuri CD (laboratoare,
centre de cercetare)

FINANȚARE: PROGRAMUL NAȚIONAL PN II - CAPACITĂȚI - Modulul I - Proiecte mari de investiții

PERIOADA DE DERULARE A PROIECTULUI: 2008-2012

LOCAȚIA PROIECTULUI: Departamentul de Fizică Moleculară și Biomoleculară
Institutul Național de Cercetare-Dezvoltare pentru
Tehnologii Izotopice și Moleculare INCDTIM Cluj-Napoca

**Proiect finanțat de Autoritatea Națională pentru Cercetare Științifică (ANCS) și
Unitatea Executivă pentru Finanțarea Învățământului Superior, a Cercetării, Dezvoltării și Inovării (UEFISCDI)
în cadrul Programului CAPACITĂȚI**