



**GUVERNUL ROMÂNIEI**

**ANCS**  
Autoritatea Națională pentru Cercetare Științifică



**INCDTIM**  
Cluj-Napoca

**MODERNIZAREA DEPARTAMENTULUI  
DE FIZICA  
MOLECULARA SI BIOMOLECULARA  
(MDFMOLBIO)**

**Program PN II Capacitati**

**INCDTIM Cluj-Napoca**

**MDFMOLBIO**  
**4 DECEMBRIE**  
**2008**



# OBIECTIVE

## *Obiectiv general:*

Modernizarea Departamentului de Fizica Moleculara si Biomoleculara prin achizitionarea unei **infrastructuri de cercetare ultramoderne**

## *Obiective specifice:*

- **Diversificarea tematicii**, a instrumentatiei aferente si a competentelor din cercetare in domeniul fizicii si tehnologiilor moleculare si biomoleculare;
- **Cresterea** semnificativa a **calitatii** activitatii de cercetare-dezvoltare;
- **Stimularea transferului tehnologic** catre beneficiari si a infiintarii de entitati productive care utilizeaza tehnologii inovative;

# OBIECTIVE

- Constituirea unui centru de inalta performanta in domeniul fizicii si tehnologiilor moleculare capabil sa:
  - coaguleze cooperarea cu specialisti din strainatate;
  - ofere masteranzilor, doctoranzilor si tinerilor cercetatori conditii de varf in ceea ce priveste pregatirea de specialitate;
  - atraga inspre domeniul cercetarii tineri absolventi;
  - stimuleze reintoarcerea in tara a cercetatorilor care isi desfasoara in prezent activitatea in strainatate;
  - ofere premisele participarii colectivelor de cercetare din INCDTIM la proiecte europene de mare anvergura si in special in Programul Cadru 7 al Uniunii Europene

# MODERNIZAREA INFRASTRUCTURII DE CERCETARE

## **CONTRIBUTIA INCDTIM:**

**Cladire P+2 cu spatii de cercetare reamenajate prin mijloace proprii:**

- reabilitarea completa a izolatiei termice si a instalatiilor sanitare;
- igienizarea incaperilor, casetarea tavanelor si dotarea cu instalatii de aer conditionat;
- reabilitarea sistemului de alimentare cu apa, gaz si curent electric.

# MODERNIZAREA INFRASTRUCTURII DE CERCETARE

## CONTRIBUTIA ANCS – PROIECTUL PN II CAPACITATI:

### LABORATOARE NOI:

- Laborator de procesare si analiza a structurilor supramoleculare
- Laborator de microscopie de scanare (STM si AFM)
- Laborator de procesare a sistemelor moleculare cu pulsuri laser ultrascorte (femtosecunde)

# INFRASTRUCTURA DE CERCETARE

## LABORATOARE MODERNIZATE:

- Laborator de modelare moleculara si simulari numerice.
- Laborator destinat sintezelor si analizelor chimice si biochimice:
  - sinteze moleculare*
  - analize fizico-chimice*
  - biochimie*
- Laborator de spectroscopie RMN
- Laborator de difractometrie de raze X
- Laborator de spectroscopie vibrationala
- Laborator de spectroscopie si calorimetrie fototermica
- Laborator destinat aplicatiilor - tehnici de microunde

# STRATEGIA ACTIVITATII DE CERCETARE-DEZVOLTARE

**Modelare → Sinteza → Fabricare → Caracterizare →  
Aplicatii**

- Modelare moleculara si simulari numerice
  - Design molecular (molecular tailoring)
- Sinteza moleculara si analize fizico-chimice
- Fabricatia structurilor moleculare si supramoleculare
  - Recunoastere moleculara
  - Autoorganizare (self-assembling)
- Caracterizarea structurilor supramoleculare
- Dezvoltarea de aplicatii de ultra-inalta performanta
  - Electronica moleculara (conductori, diode, tranzistori, porti logice...etc.)
  - Dispozitive moleculare ( navete moleculare, motoare, pensete, etc.)
  - Materiale moleculare inteligente (smart materials)
  - Sisteme moleculare de transport si eliberare controlata a medicamentelor
  - Noi tehnici de procesare cu control la nivel molecular

# L1 Laborator de procesare si analiza a structurilor supramoleculare

Conditii  
speciale  
pentru  
procesarea  
probelor  
“clean  
room”



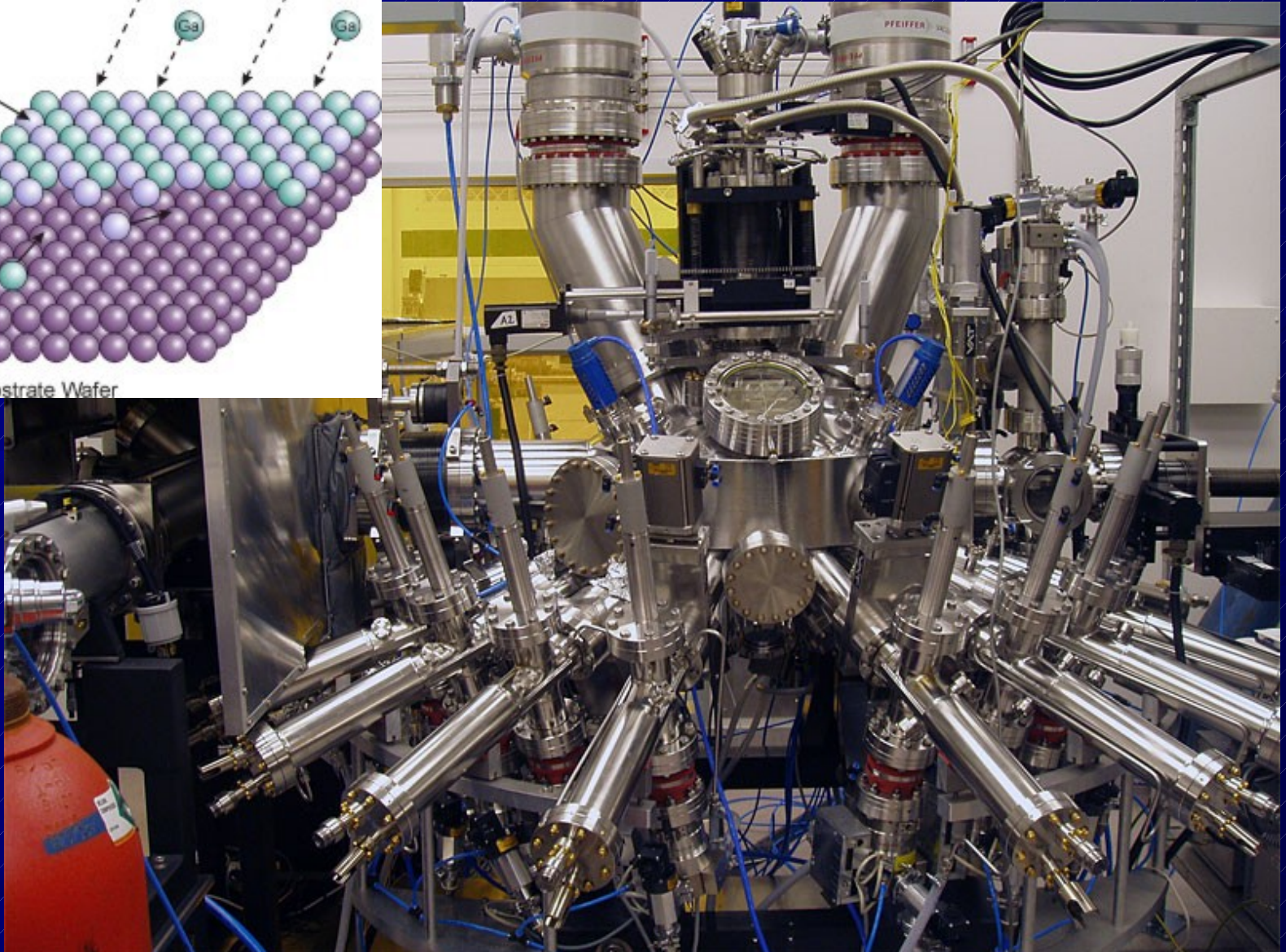
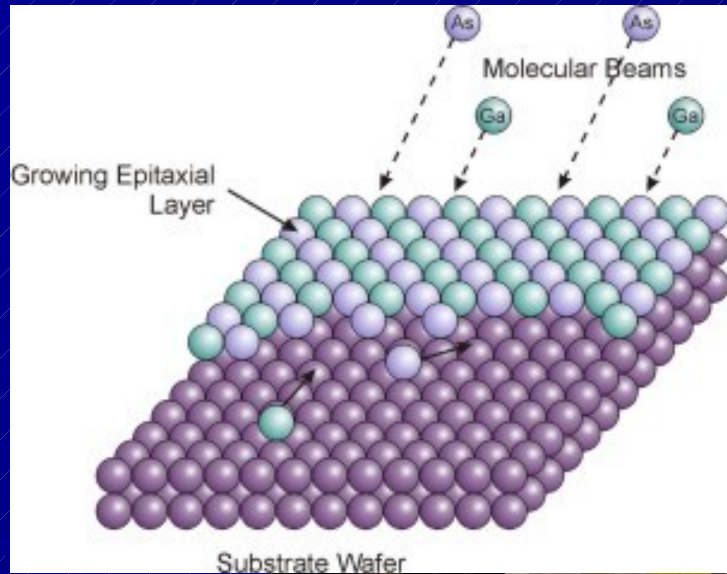




INCDTIM  
Cluj-Napoca

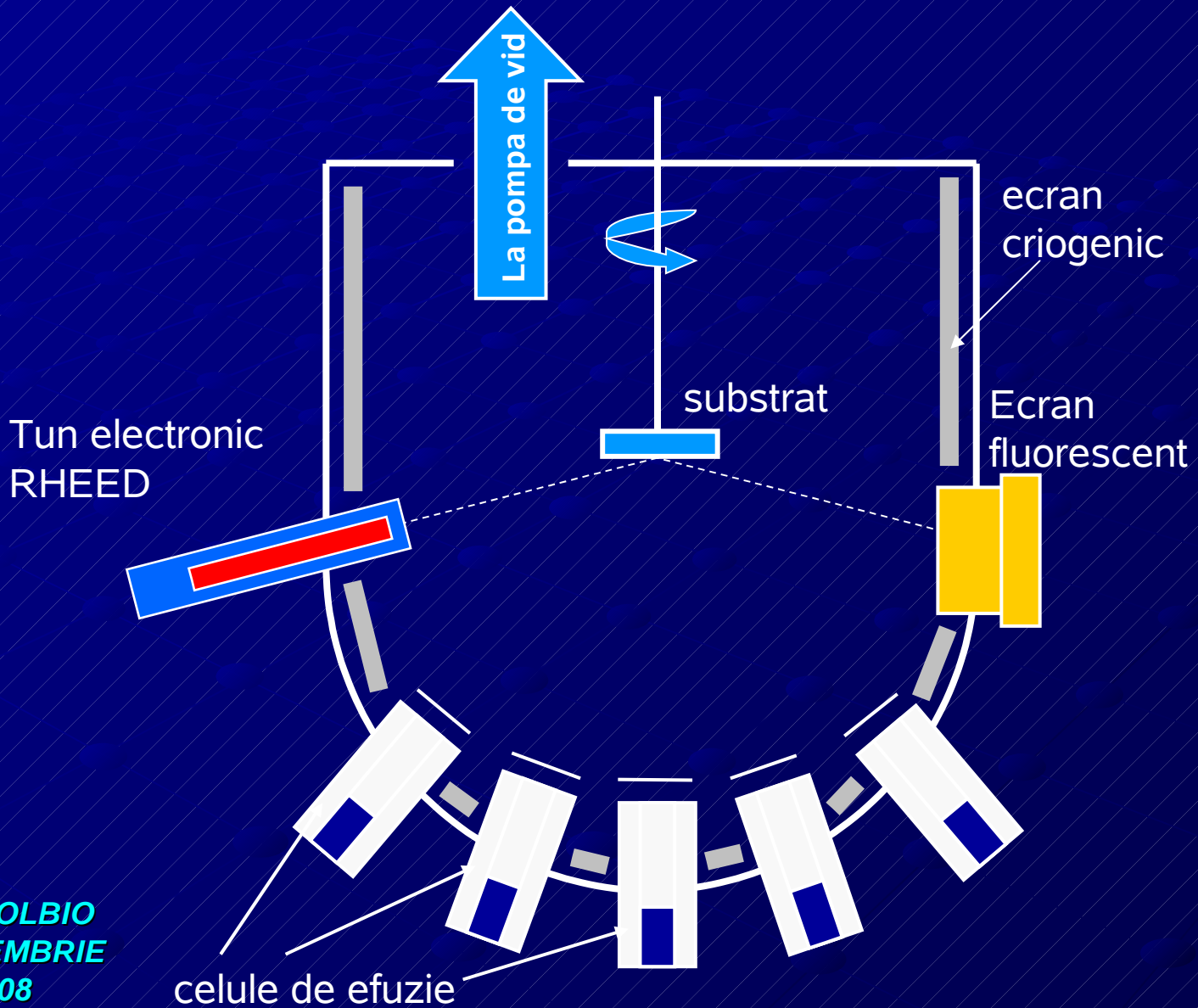
# Epitaxie moleculara, “Molecular Beam Epitaxy” (MBE)

L1



MDFMOLBIO  
4 DECEMBRIE  
2008

# MBE - Schema de principiu





INCDTIM  
Cluj-Napoca

# Aplicatii MBE

## Exemple

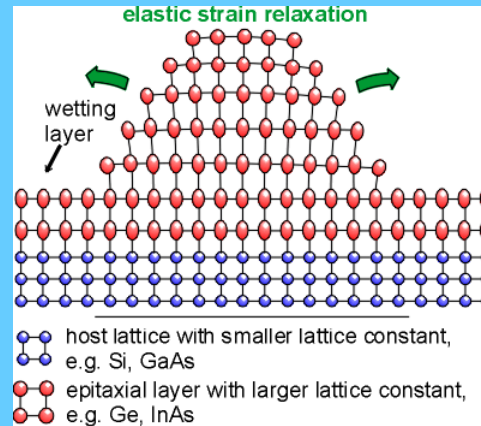
### Celule fotovoltaice



### Diode luminescente

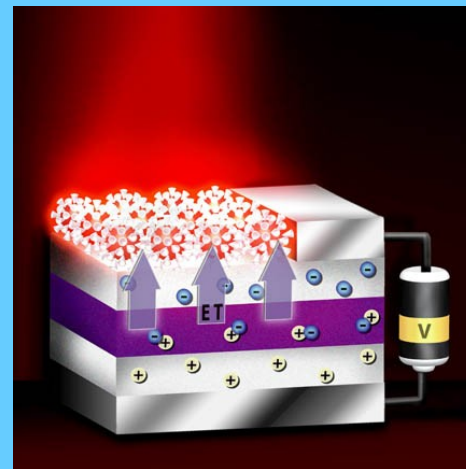


### Quantum dots

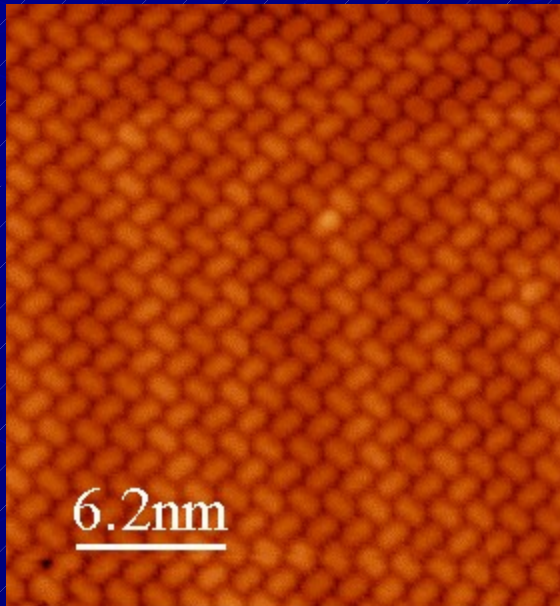


### Dispozitive semiconductoare

### Quantum wells



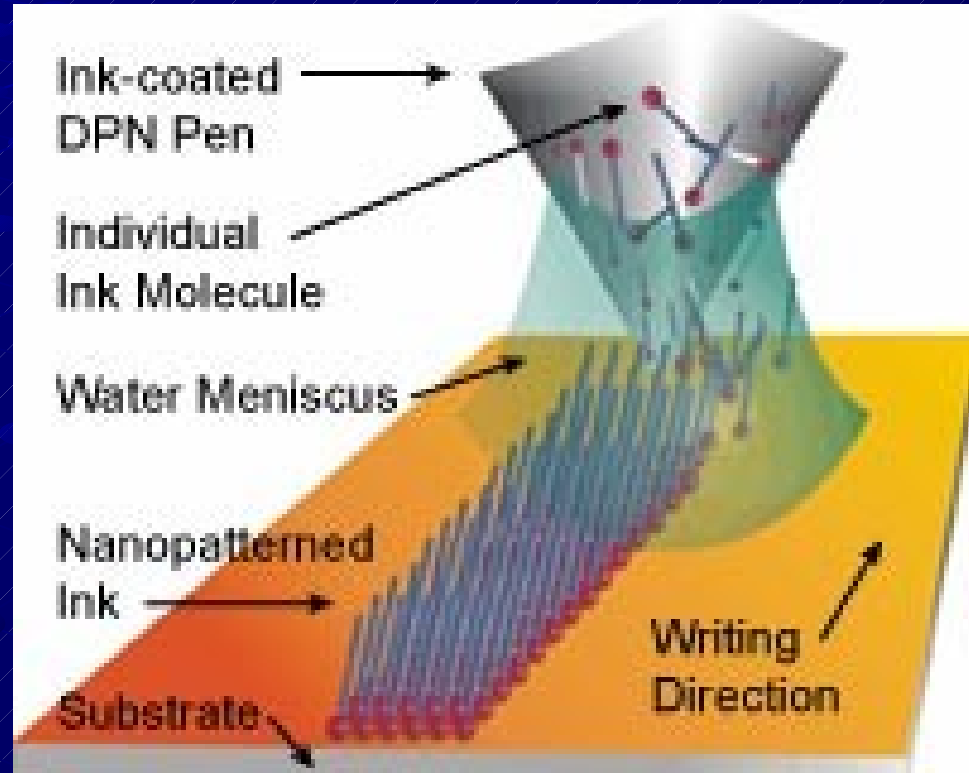
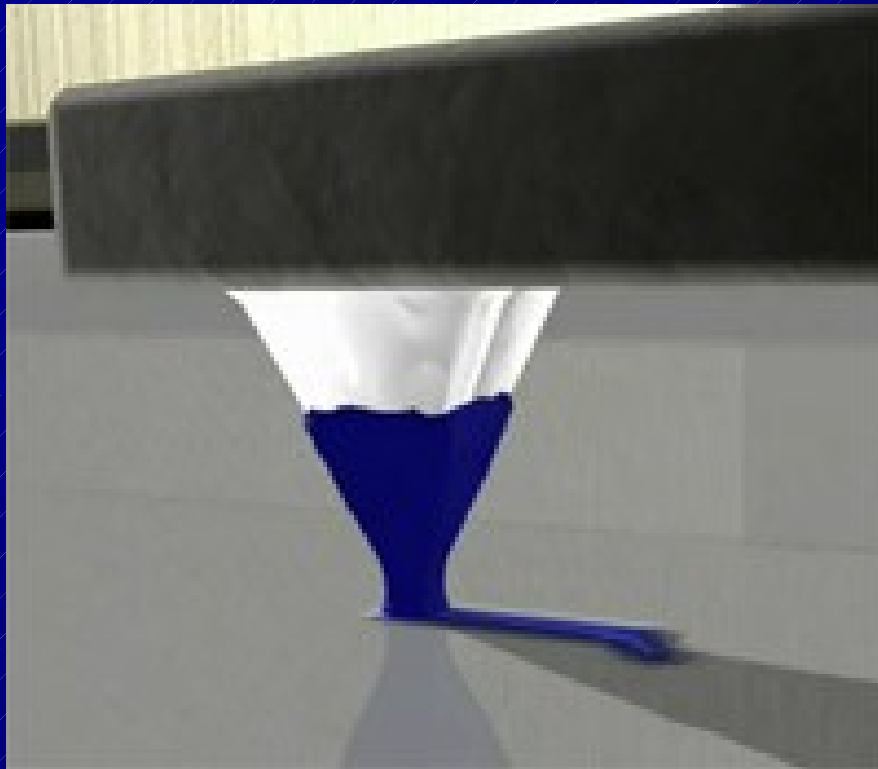
### Monostraturi moleculare autoasamblate





L1

# Echipament integrat de tip “Molecular Inkjet Printing”

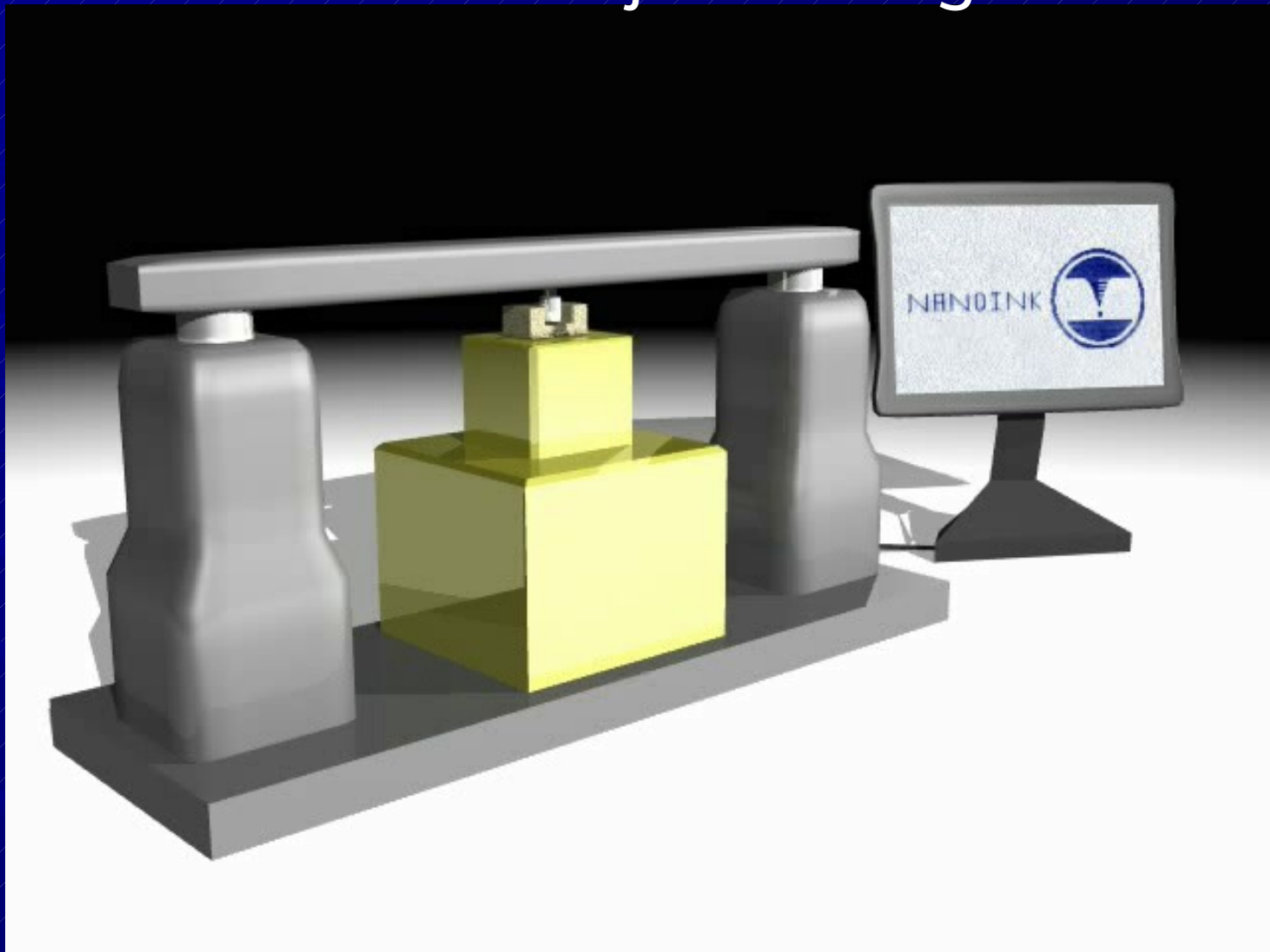


L1

# Echipament integrat de tip “Molecular Inkjet Printing”



INCDTIM  
Cluj-Napoca



MDFMOLBIO  
4 DECEMBRIE  
2008

<http://www.nanoink.net/>

# Echipament integrat destinat tehnologiei "nano-imprint"



Litografierea prin nano-imprimare:  
b) termoplastica  
b) fotografica

Exemple de instalatii de tip nano-imprint

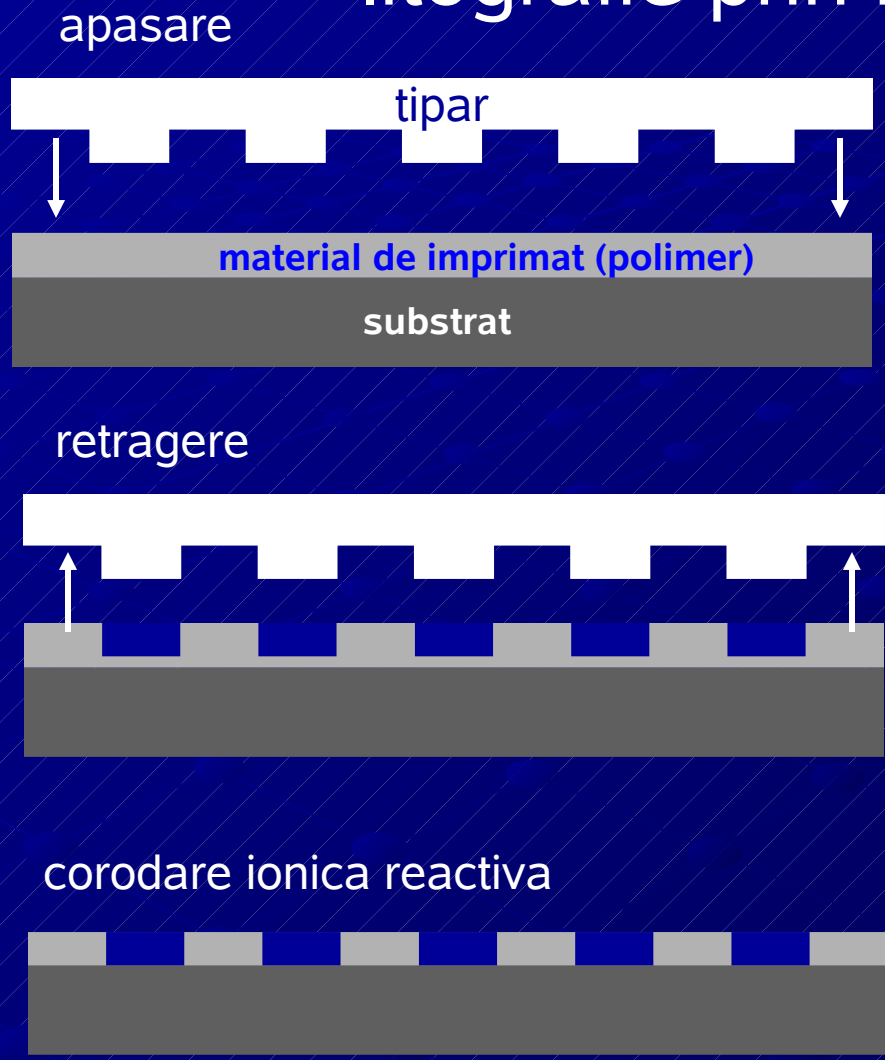




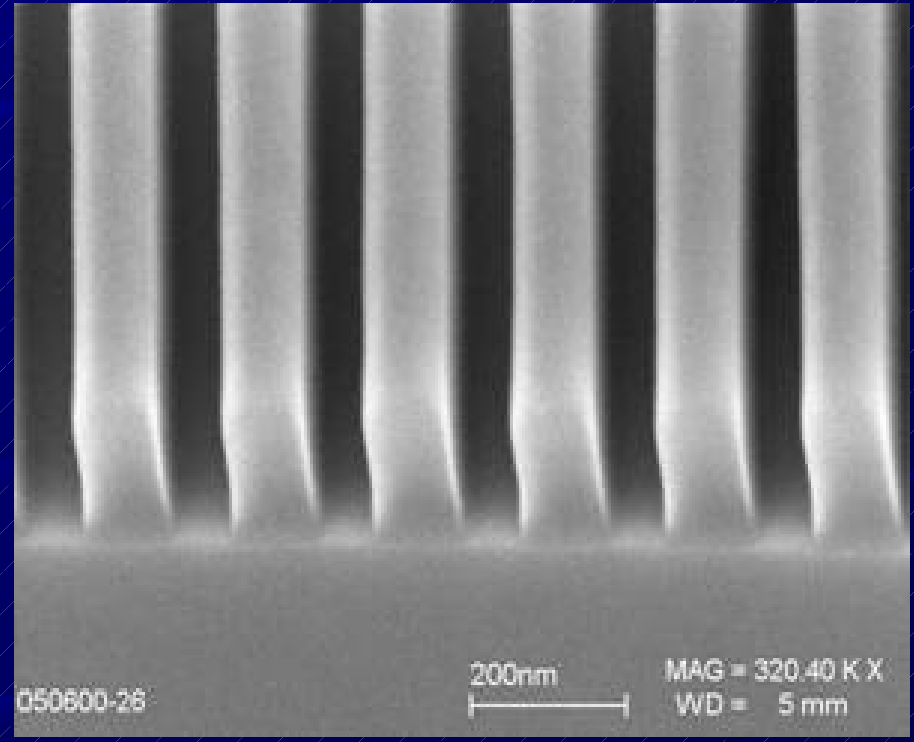
INC DTIM  
Cluj-Napoca

L1

# Principiul metodei de litografie prin nano-imprimare



rezultat

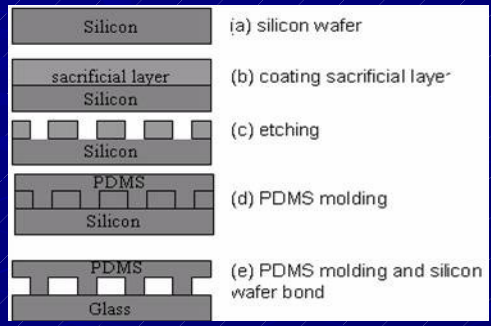




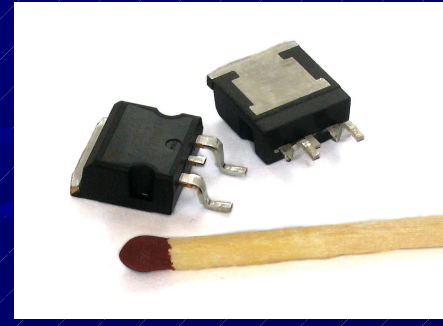
## Dispozitive:

- electronice;
- optice;
- fotonice;
- biologice

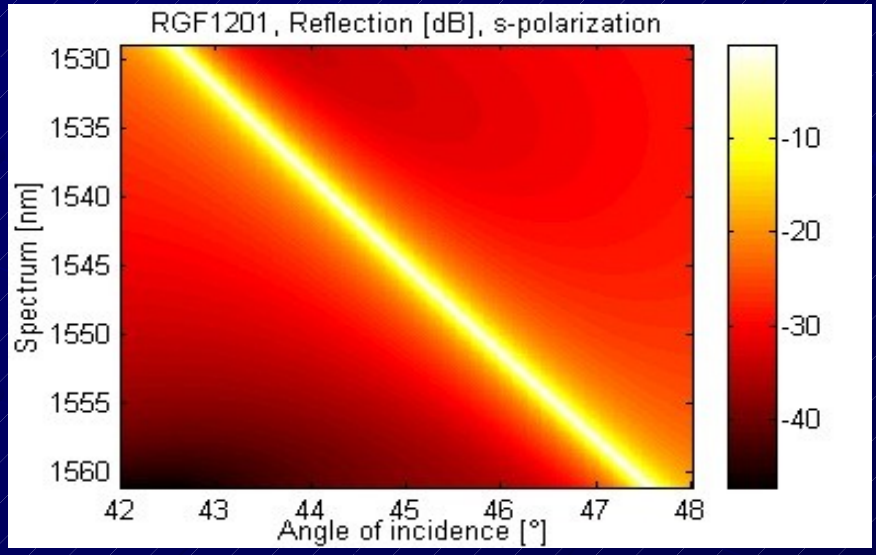
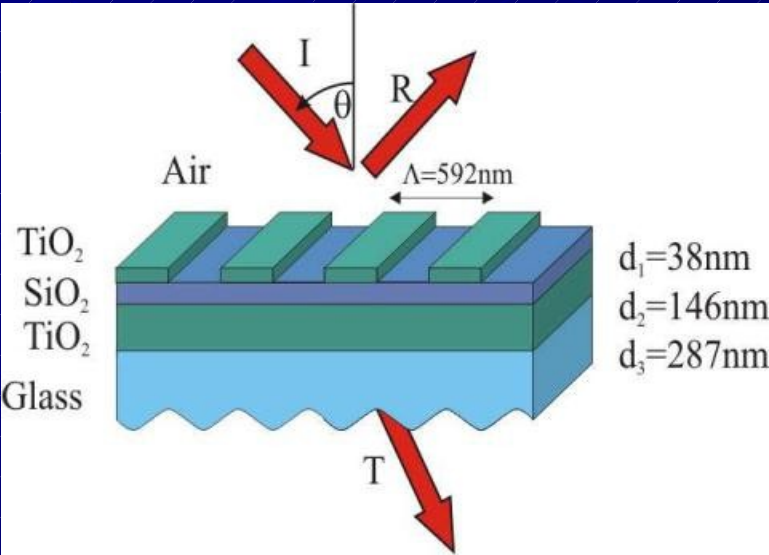
### canale nanofluidice pentru "intinderea" ADN-ului



### metal-oxide-semiconductor field-effect transistor (MOSFET)



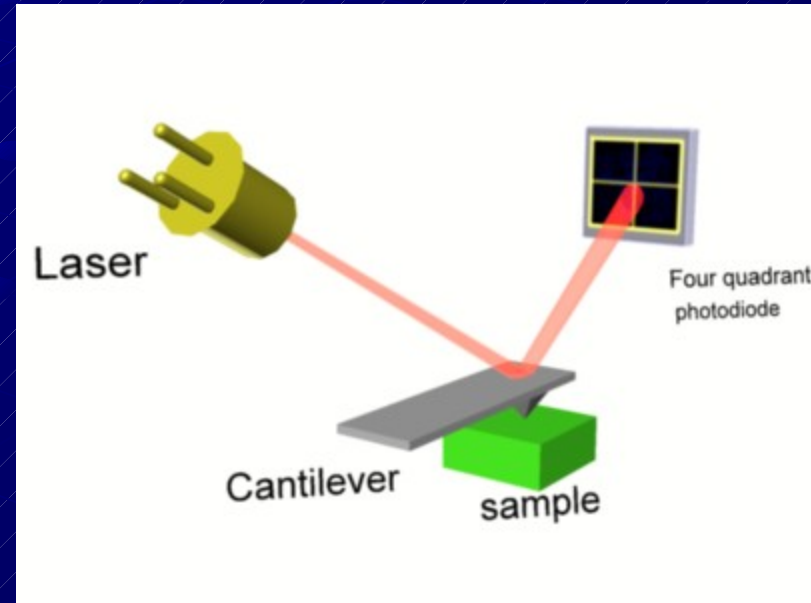
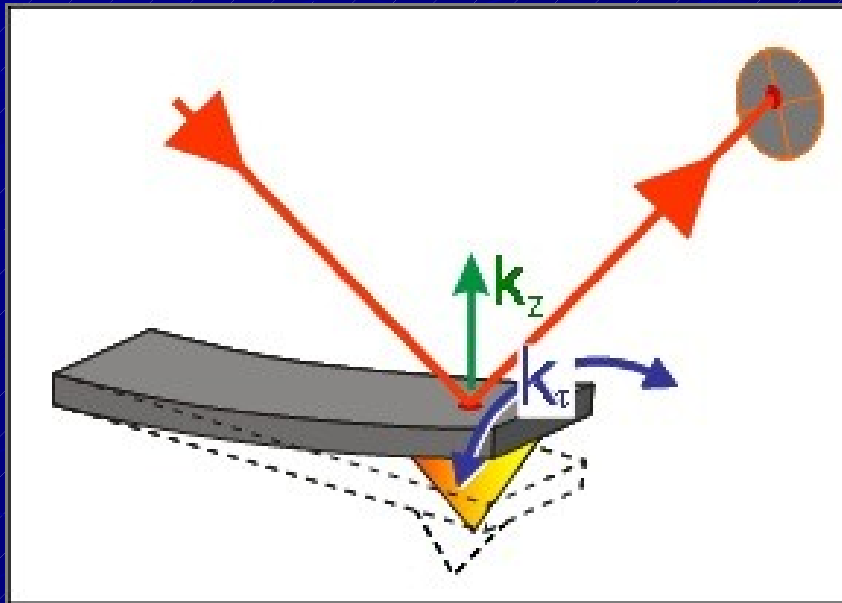
## Filtre optice cu retele de difractie rezonante





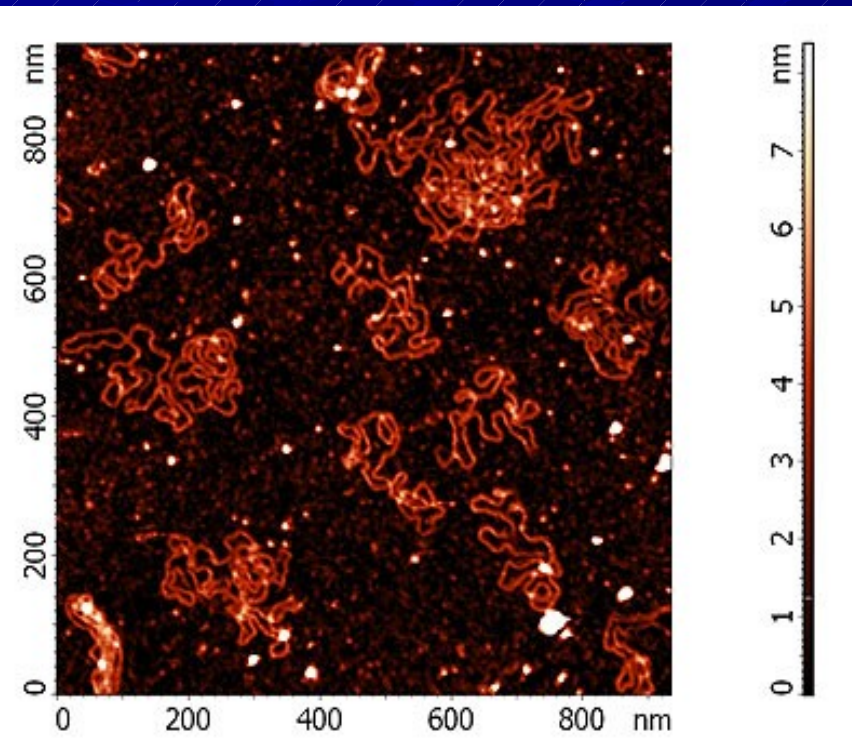


## AFM

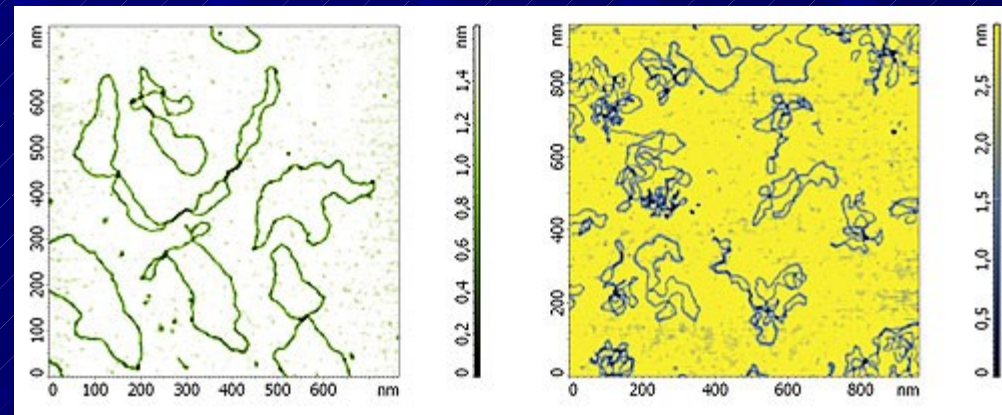


## Scheme de principiu

## AFM



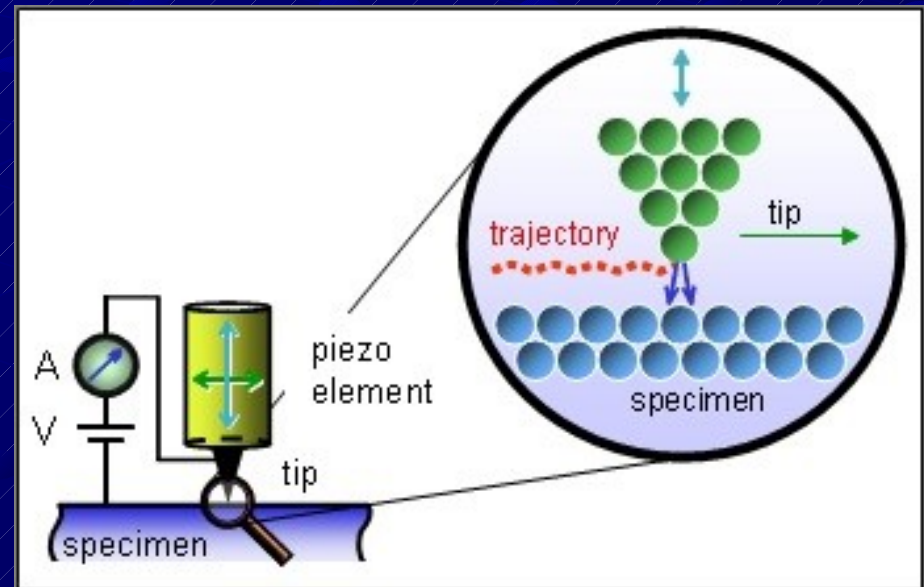
ADN pe mica  
tehnica de semicontact  
in apa



ADN pe mica  
tehnica de semicontact  
in aer

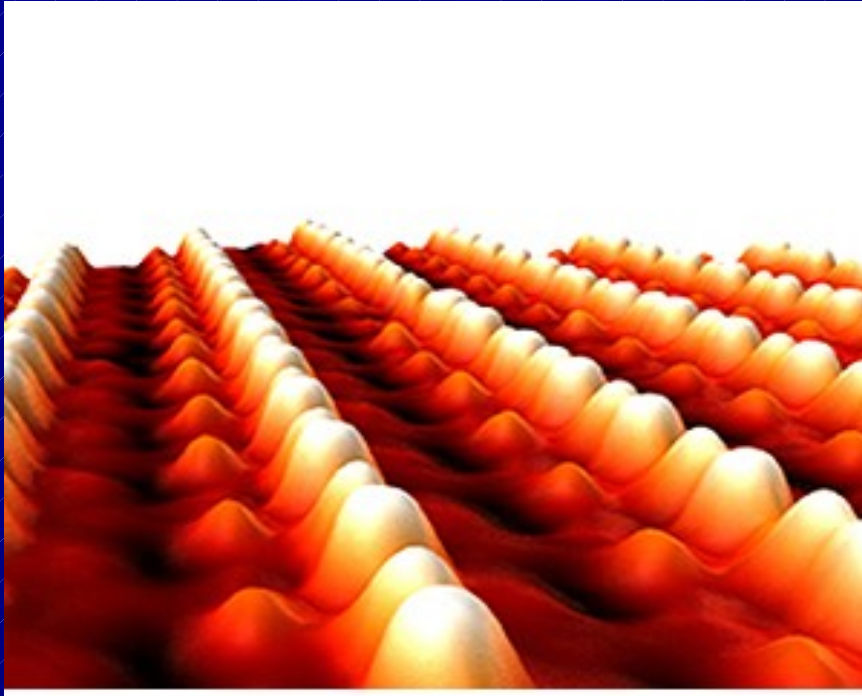


## STM

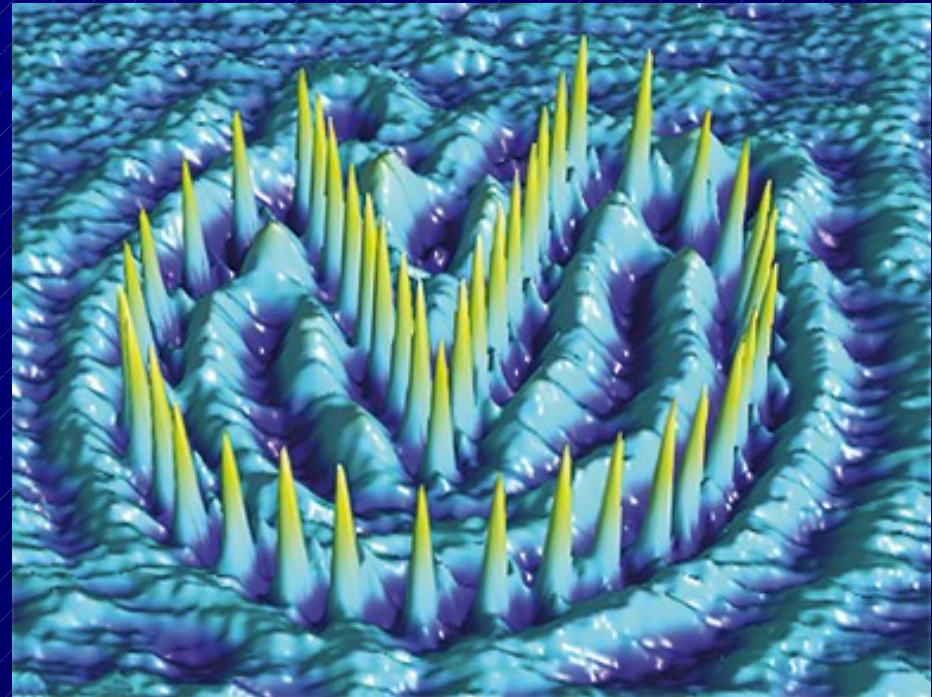




## Densitati de stari localizate



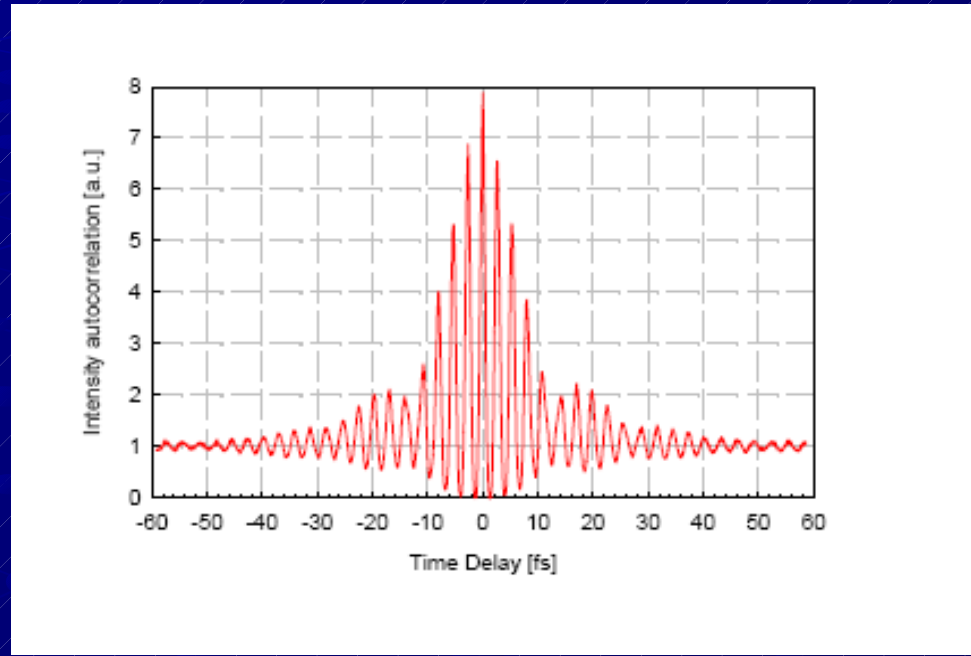
Nanofire de platina autoorganizate  
pe o suprafata de Ge (001)  
la temperatura camerei



Corali cuantici  
Manipularea atomilor de Co  
pe o suprafata de Cu (111)



# L3 Sistem laser in impulsuri ultrascurte (femtosecunde)

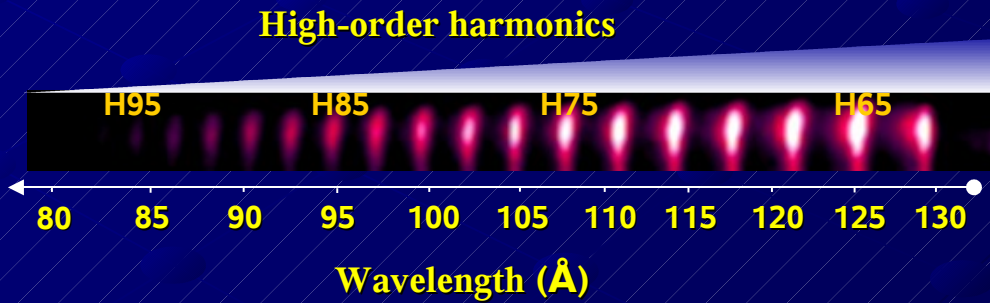
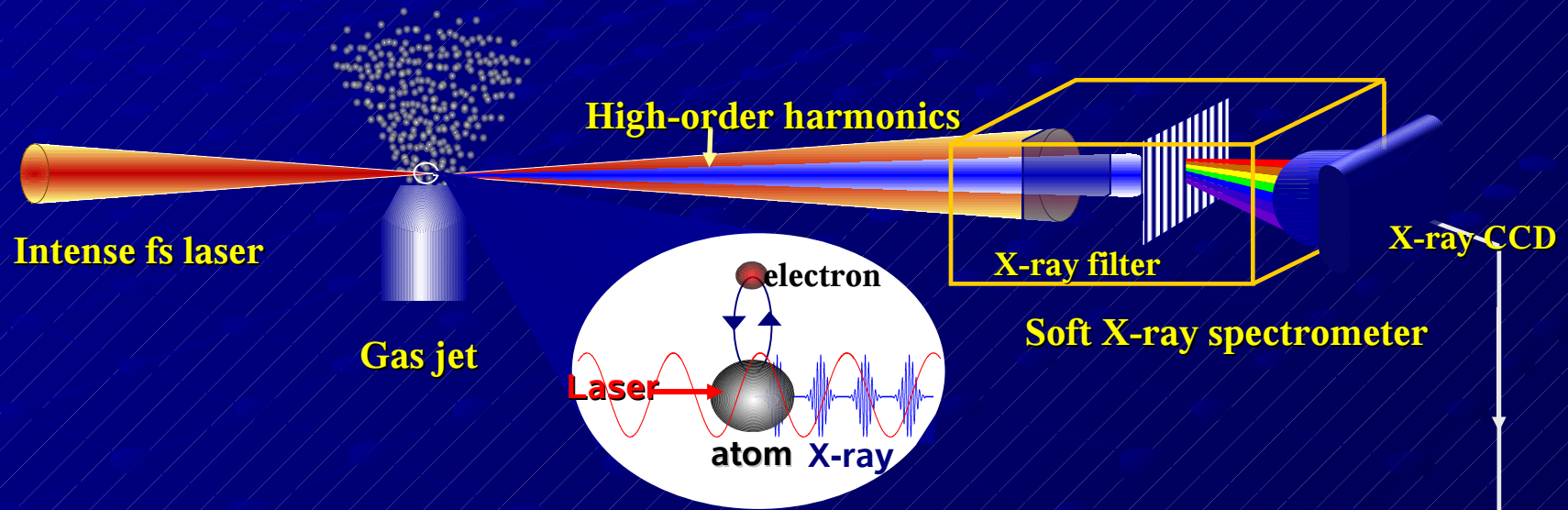


1 fs = 0.0000000000000001 s  
= timpul in care lumina parcurge 0.3 microni

Un puls laser de 20 fs emis la 800 nm (perioada 2.6 fs)  
contine doar cateva oscilatii ale campului electromagnetic



# L3 Generare de pulsuri de attosecunde in domeniul XUV



# L3 De ce impulsuri ultrascurte la procesarea materialelor?

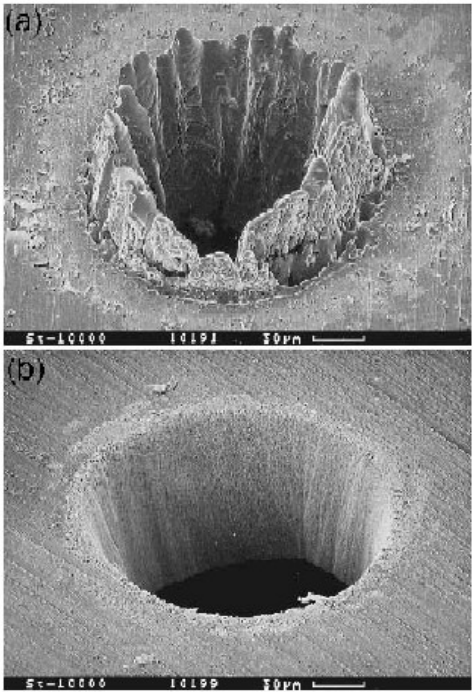


Fig. 2. SEM photographs of holes drilled through a 100  $\mu\text{m}$  steel foil with (a) a pulse duration of  $\tau_H = 3.3$  ns and a fluence of  $F = 4.2$  J/cm<sup>2</sup> and (b)  $\tau_H = 200$  fs and  $F = 0.5$  J/cm<sup>2</sup> using Ti:sapphire laser pulses at 780 nm.



*nanosecunde*

*In cazul impulsului de nanosecunde plasma se formeaza inainte de terminarea pulsului*



*femtosecunde*

*impulsul laser fs nu interactioneaza cu plasma produsa*

*Diferente semnificative intre 2 regimuri temporale.*

# Creare de nanostructuri cu laserul cu Ti:Sa

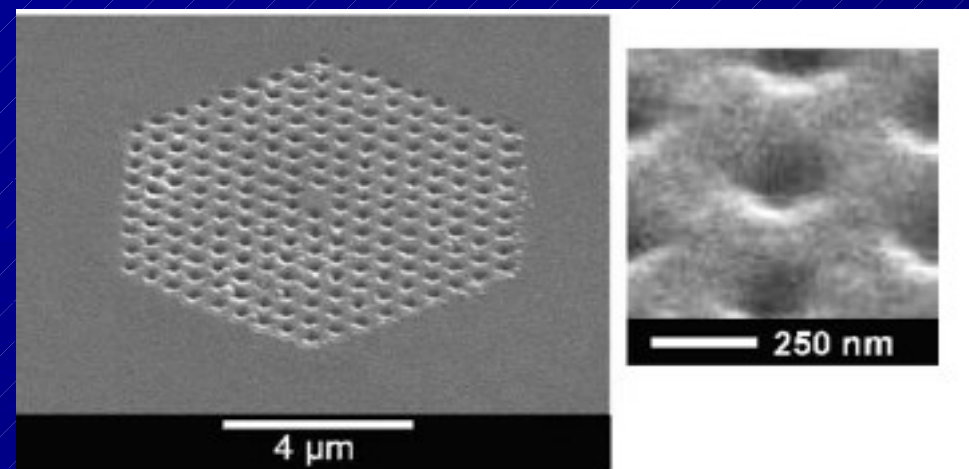
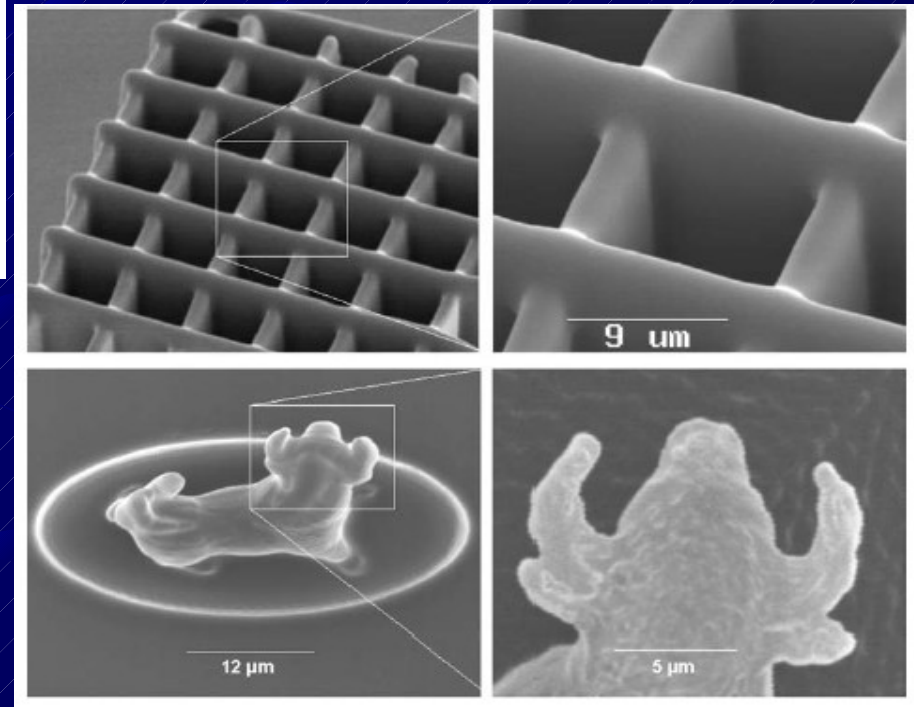


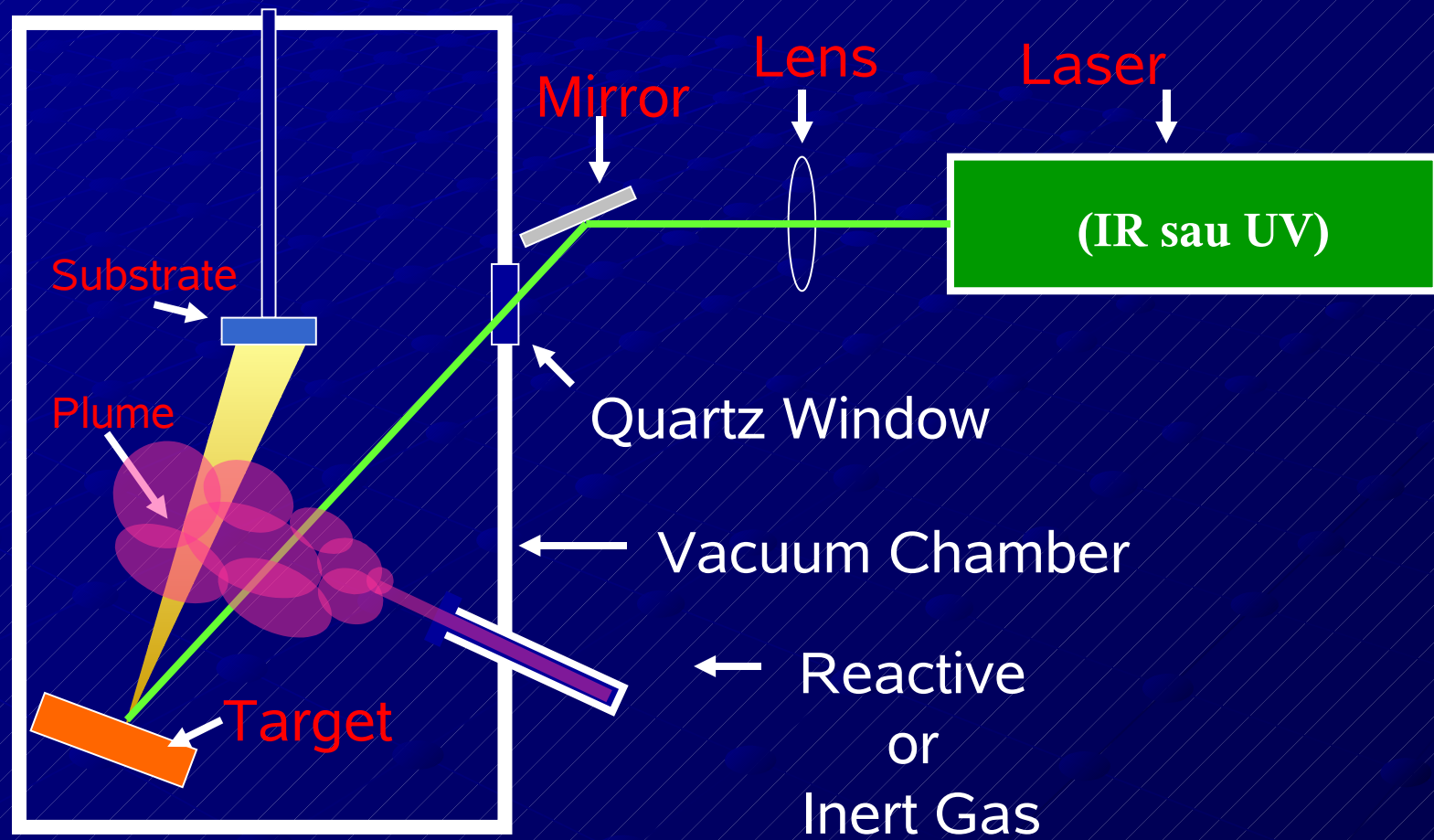
FIGURE 7 An example of a periodic nanostructure (with a defect cavity in the center) fabricated in a sapphire crystal with femtosecond laser pulses (left). On the right side, an enlarged fragment of a single hole is shown

FIGURE 8 SEM images of a three-dimensional periodic structure (top) and a micro-bull statue (bottom) fabricated by two photon-polymerization in a hybrid polymer using femtosecond laser pulses. Corresponding enlarged fragments are shown on the right side

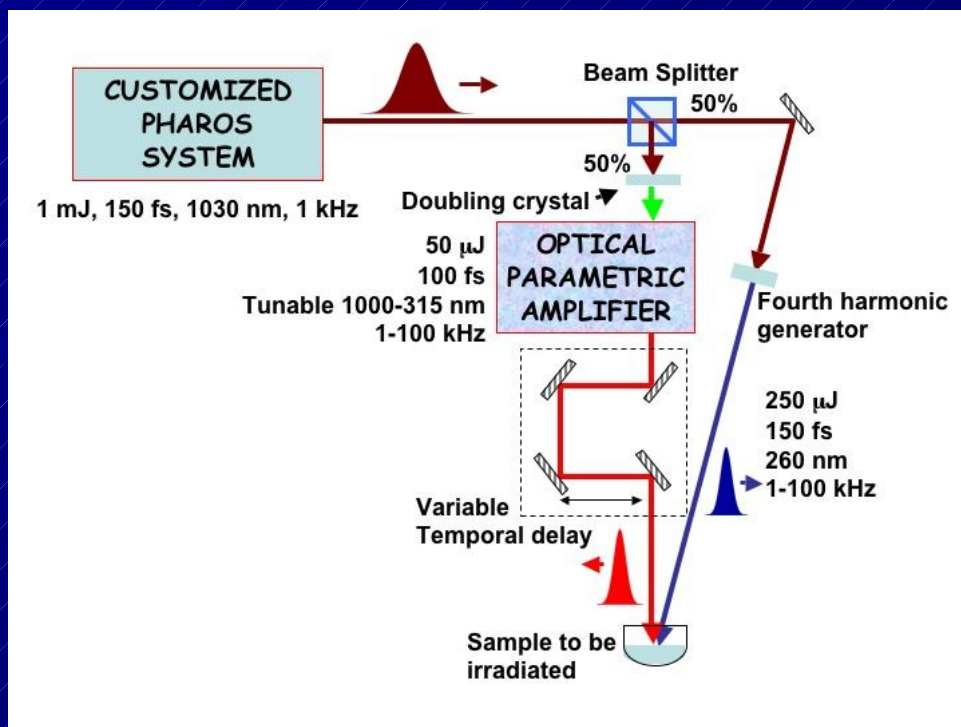


*Korte et al, Appl. Phys. A 77, 229 (2003)*

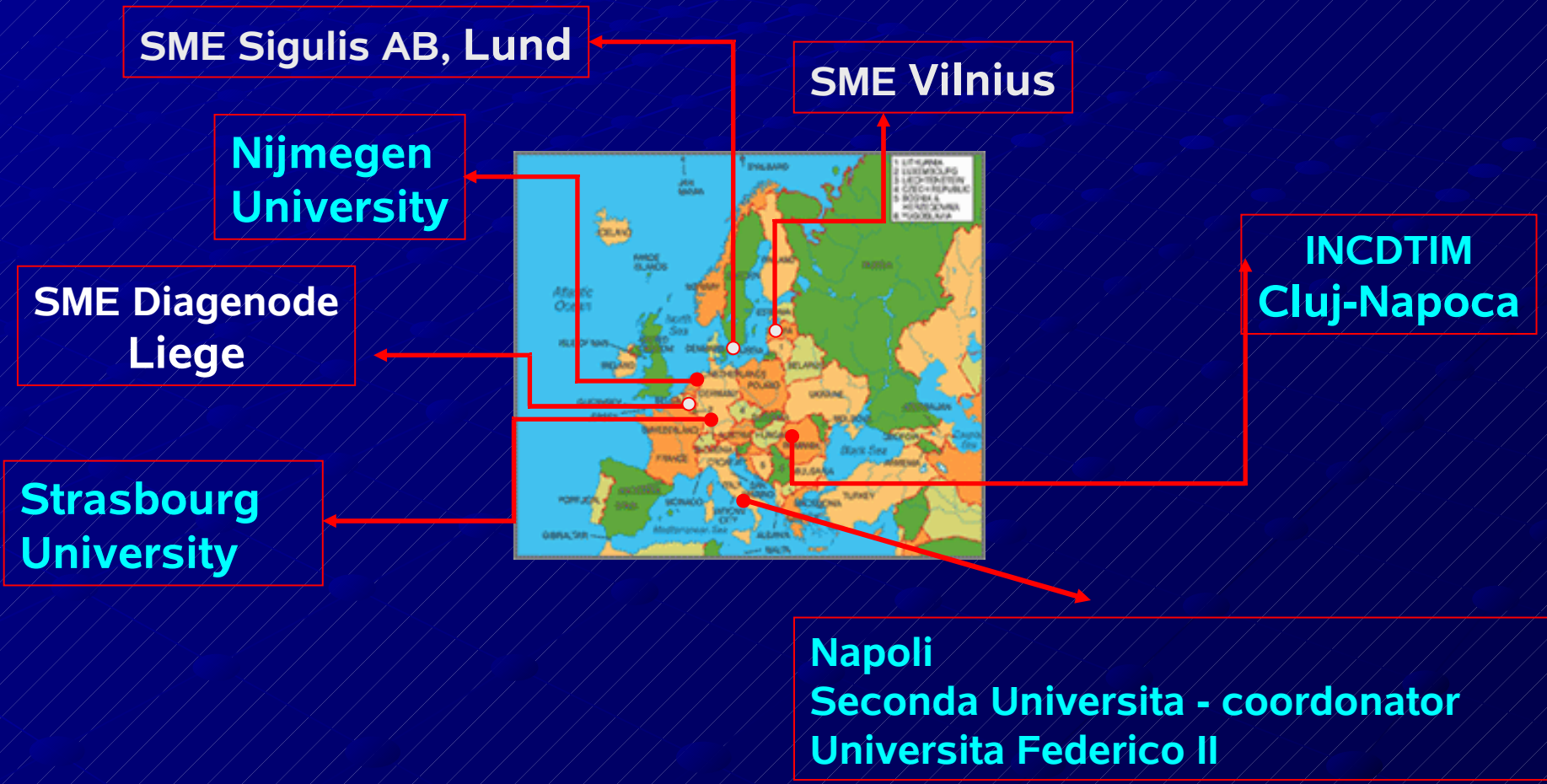




Un sistem laser in impulsuri ultrascurte dedicat procesarii la nivel molecular in sisteme biomoleculare AND/proteine



# ATLAS Teams



# L4 Laborator de modelare moleculara si simulari numerice



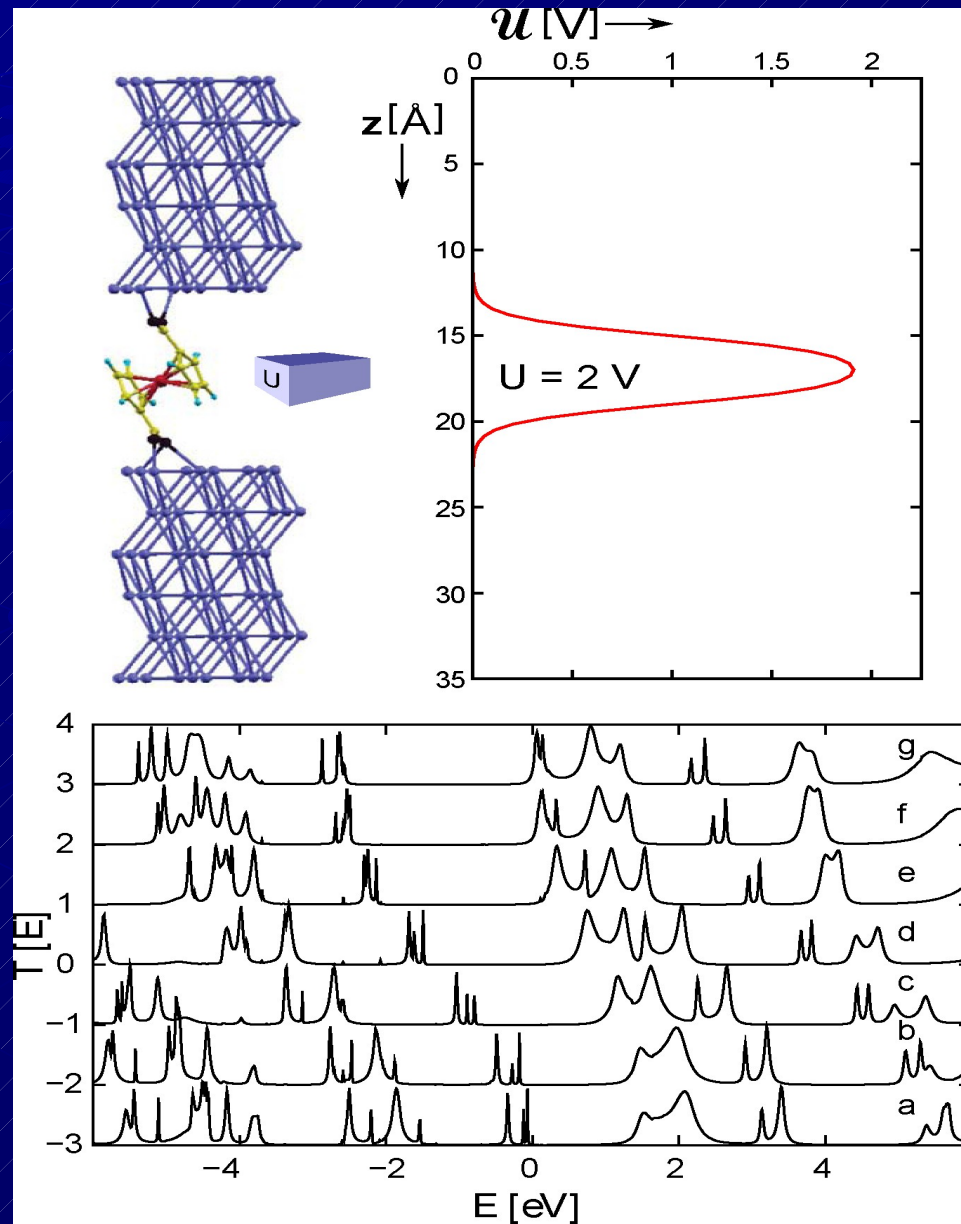
INCDTIM  
Cluj-Napoca



**MDFMOLBIO**  
**4 DECEMBRIE**  
**2008**

# L4 Laborator de modelare moleculara si simulari numerice

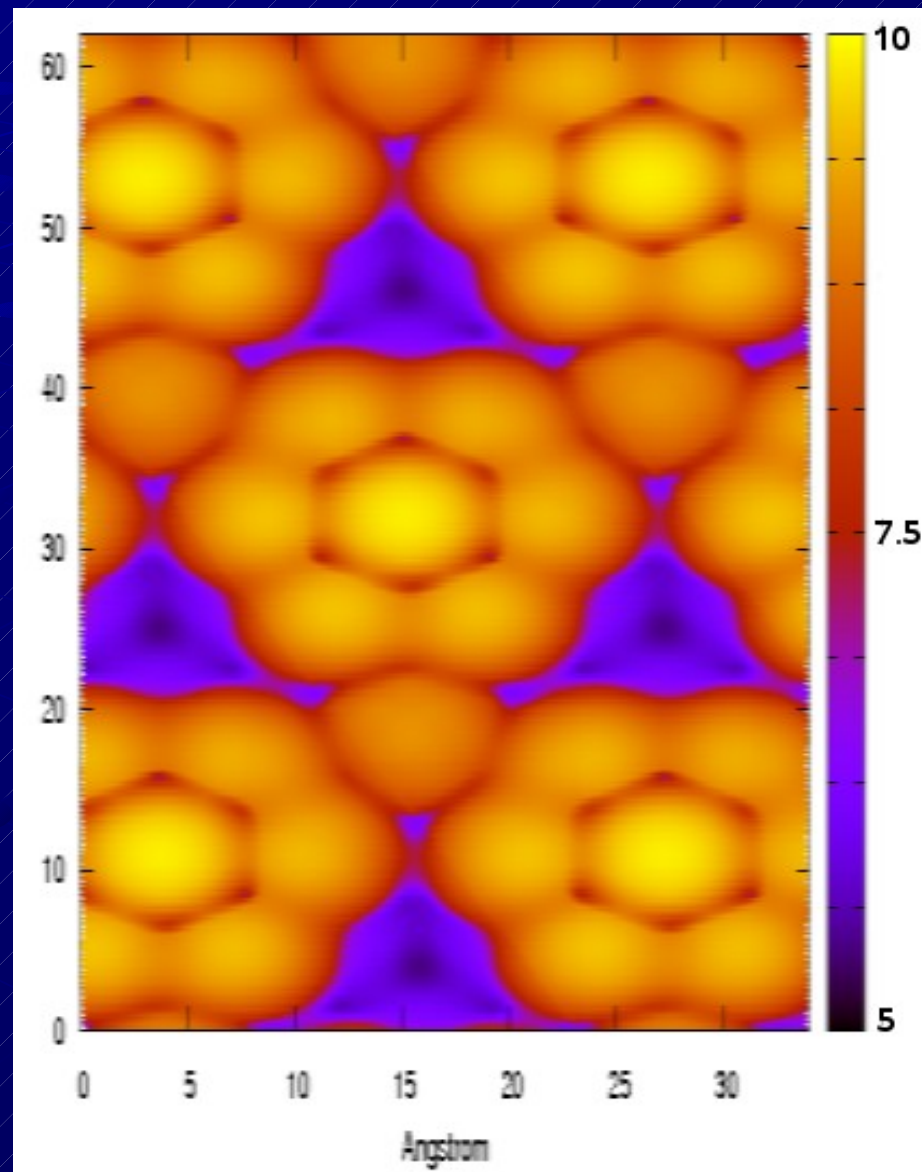
## Tranzistor molecular



## Simularea de imagini STM

Imagine STM la  
curent constant

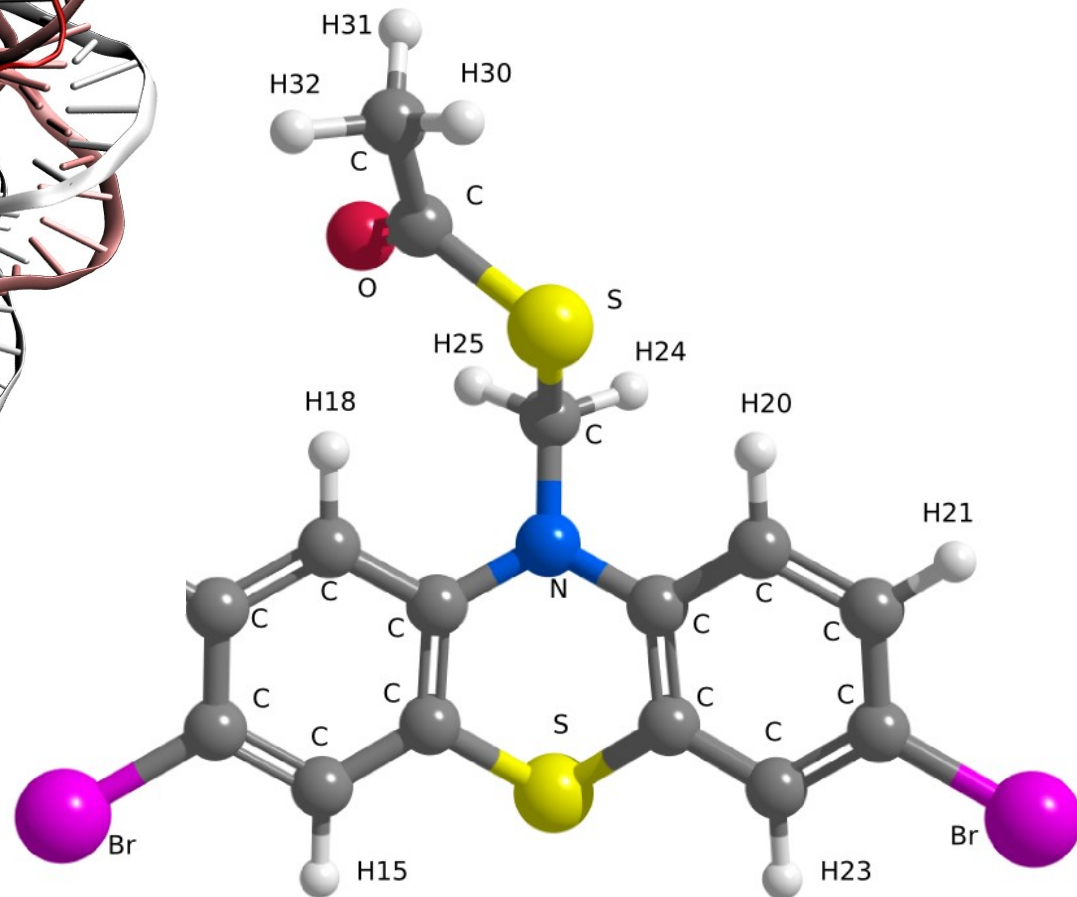
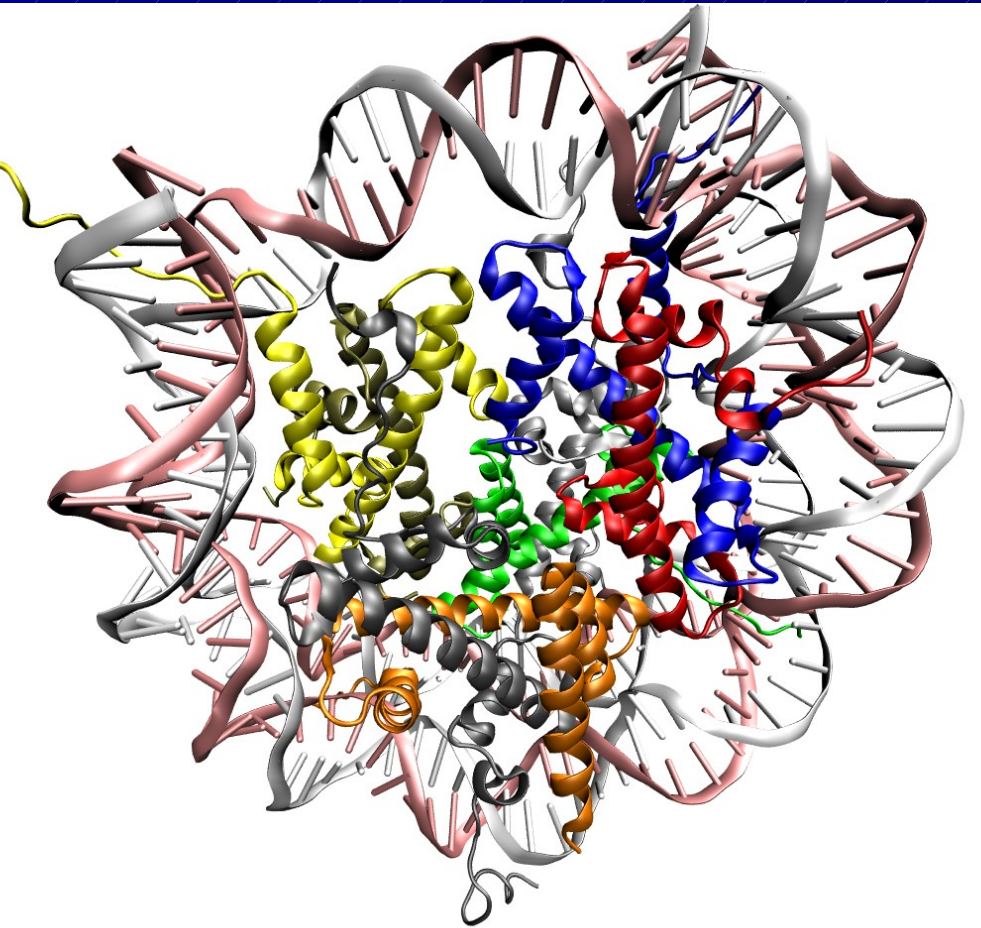
Suprafata de ZnO



# L4 Laborator de modelare moleculara si simulari numerice

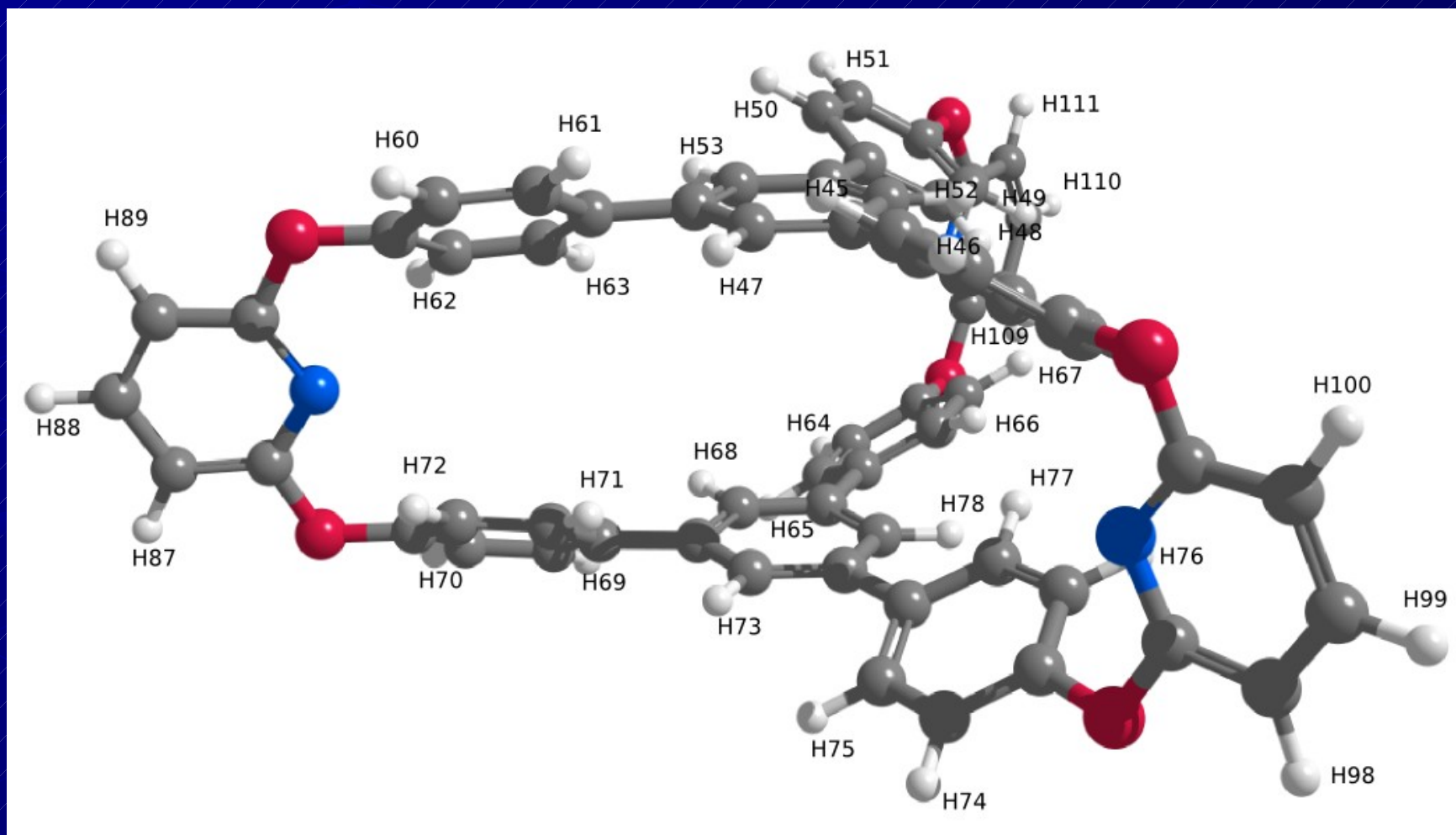


INCDTIM  
Cluj-Napoca



MDFMOLBIO  
4 DECEMBRIE  
2008

# L4 Laborator de modelare moleculara si simulari numerice

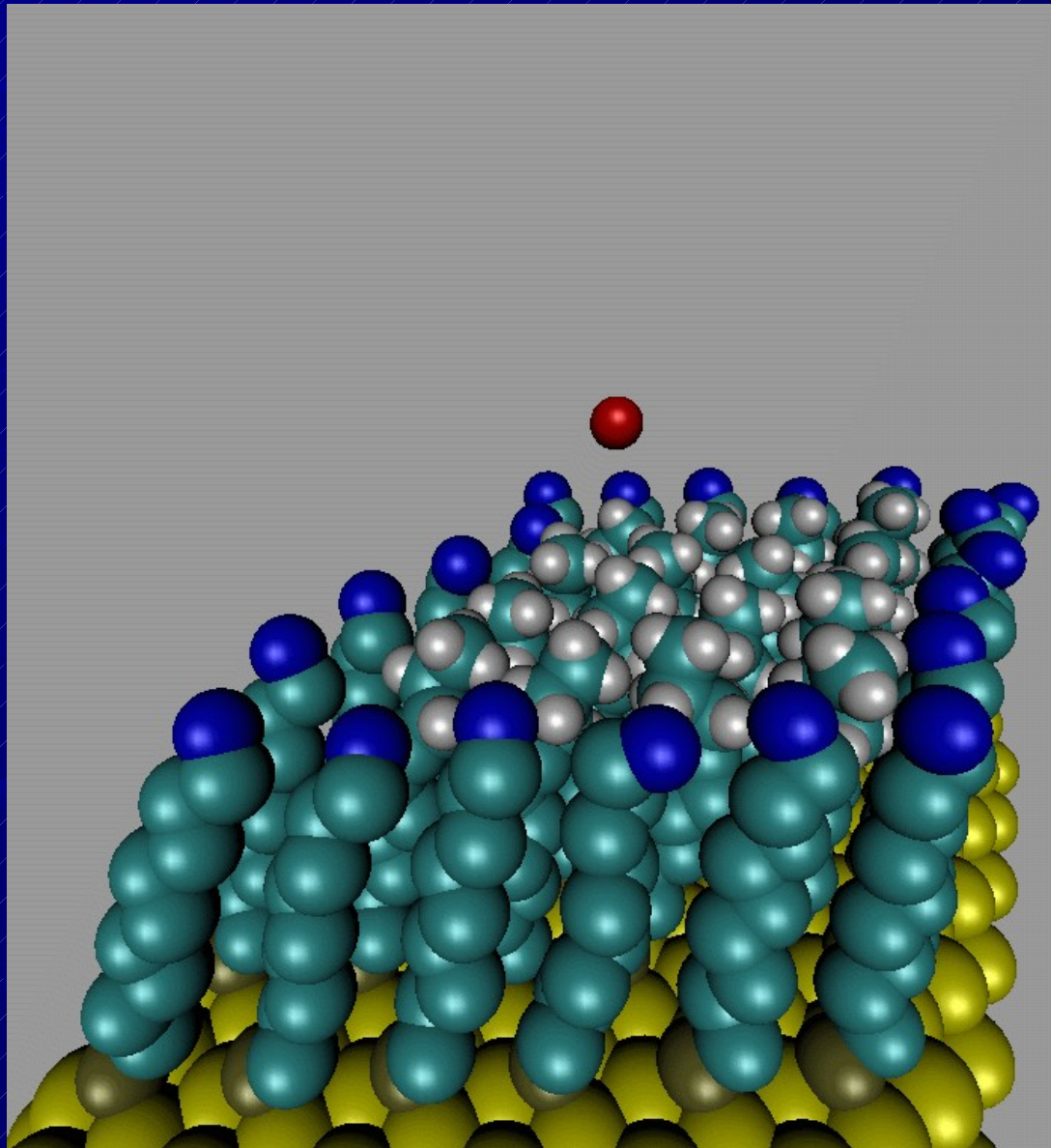




# L4 Laborator de modelare moleculara si simulari numerice



INC DTIM  
Cluj-Napoca

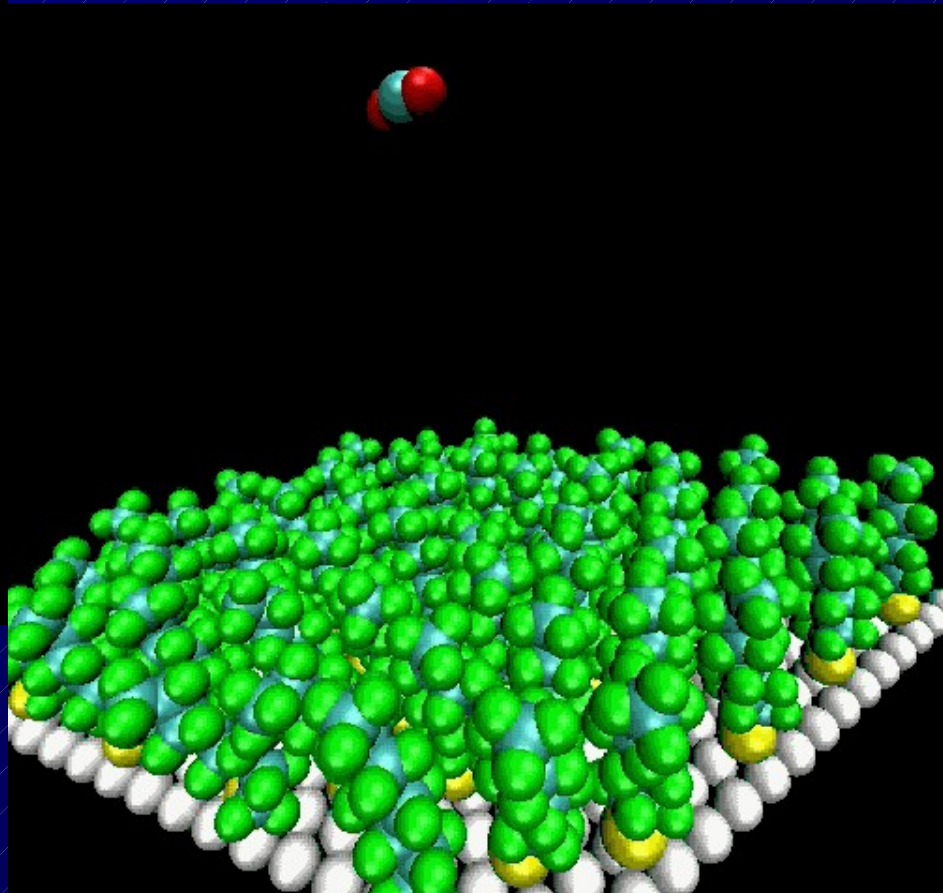
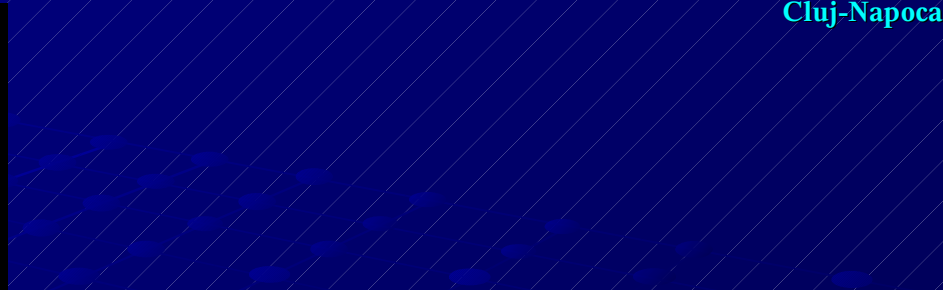
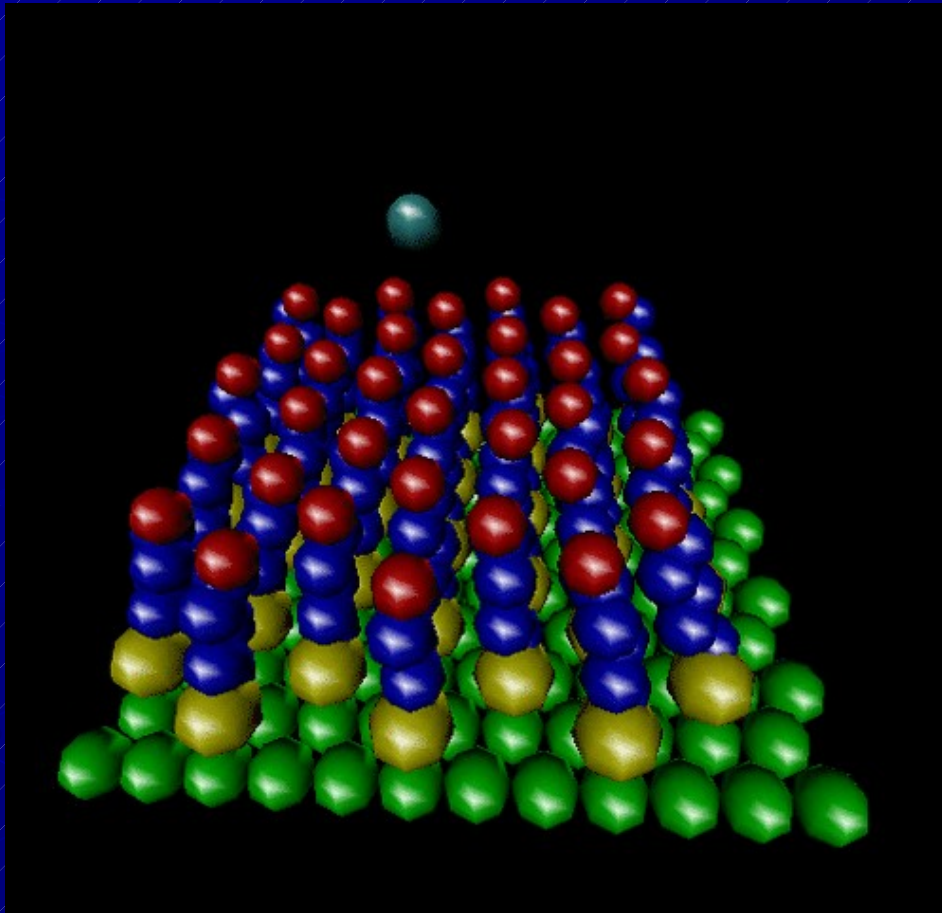


MDFMOLBIO  
4 DECEMBRIE  
2008

# L4 Laborator de modelare moleculara si simulari numerice



INCDTIM  
Cluj-Napoca



MDFMOLBIO  
4 DECEMBRIE  
2008

# Laborator chimie si biochimie *sinteze*



Instalatie de purificare  
a apei



Baie de ultrasonare



Agitator magnetic



Nisa chimica



Aparat pentru determinarea  
punctului de topire



Cuiburi de incalzire



Pompa de vid



Lampa UV



Etuva cu convecție forțată



Rotaevaporator



Spin-coater



pH-/ion-metru



Calorimetru de titrare izoterma



Viscozimetru



Spectrofotometru UV-Vis

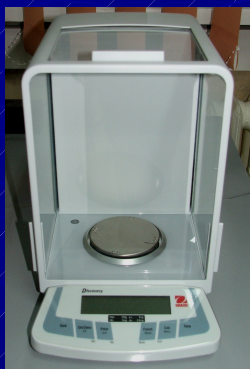


Ultracentrifuga



Agitator

Lampa UV  
pentru sterilizare



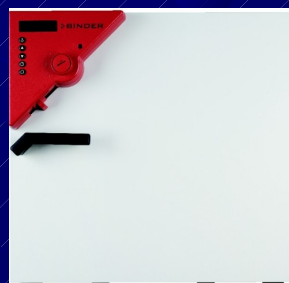
Balanta electronica



Nisa sterila



Baie de ultrasonare



Etuva cu convecție forțată



Incubator



Autoclava

**Dotari  
existente**

**De achizitionat  
prin proiectul  
CAPACITATI**



**Spectrometru RMN  
de inalta rezolutie  
pe lichide (500 MHz)**

**Spectrometru RMN  
pe solide (500 MHz)  
de ultima generatie**



## *Spectrometrul RMN pe solide de 500 MHz / Performante*

*Primul spectrometru  
RMN din tara dedicat  
exclusiv aplicatiilor  
de inalta putere pe solide*

Dotat cu trei canale de radio-frecventa



Fac posibile experimente de tripla rezonanta



## Spectrometrul RMN pe solide de 500 MHz / Performante

*Primul spectrometru  
RMN din tara dedicat  
exclusiv aplicatiilor  
de inalta putere pe solide*

Dotari de ultima generatie pentru controlul simultan  
al amplitudinii, frecventei si fazei pulsurilor



Acuratete crescuta in experimente RMN 1D, 2D si 3D





## Spectrometrul RMN pe solide de 500 MHz / Performante

*Primul spectrometru  
RMN din tara dedicat  
exclusiv aplicatiilor  
de inalta putere pe solide*

Dotat cu intreaga gama de capuri de proba, inclusiv  
cap de proba de tip *Ultra Fast MAS*, recent introdus



Frecvente de rotatie a probei de pana la 70 kHz

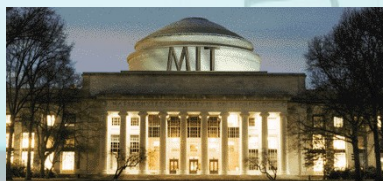


## Spectrometrul RMN pe solide de 500 MHz / Resursa umana

Nanoscale Organisation  
and Dynamics Group  
University of Western Sydney

*Va fi operat de  
o echipa cu  
inalta calificare  
in domeniu*

*Formare profesionala in centre  
de mare prestigiu, cum ar fi*



*MIT, Cambridge, SUA*



*RWTH, Aachen, Germania*



*Max Planck Inst for Polymer  
Research, Mainz, Germania*



## *Spectrometrul RMN pe solide de 500 MHz / Resursa umana*

*Va fi operat de  
o echipa cu  
inalta calificare  
in domeniu*

*Rezultate remarcabile in aplicatii  
practice dar si in dezvoltarea de  
noi metode RMN pe solide:*

ZF-3D-TEDOR: *J. Am. Chem. Soc.* **124**, 10728 (2002)

RS-HEPT: *J. Magn. Reson.* **176**, 239 (2005)

Remote-Protons CP/MAS: *J. Magn. Reson.* **183**, 65, (2006)



**Spectrometrul RMN pe solide de 500 MHz / Aplicatii Practice pentru potentiali parteneri interesati de:**

**Determinare de parametri structurali cu rezolutie atomica pentru o gama foarte larga de sisteme moleculare**

**Dinamica moleculara si interactiuni moleculare**

## Domeniul Farmaceutic

**Caracterizarea structurala a substantelor biologice active in faza solida:** formarea de polimorfi, co-cristale, solvati; studii de stabilitate si interactiune cu excipientii

**Rational Drug Design:** caracterizare structurala a complexilor substrat-ligand (ex. proteina-medicament)



*Spectrometrul RMN pe solide de 500 MHz / Aplicatii Practice pentru potentiali parteneri interesati de:*

*Determinare de parametri structurali cu rezolutie atomica pentru o gama foarte larga de sisteme moleculare*

*Dinamica moleculara si interactiuni moleculare*

## Sisteme (Bio)Moleculare

Structurii si dinamica moleculara in sisteme de interes biologic: polipeptide, carbohidrati, sisteme nucleotidice, etc.

Chimie supramoleculara: organizare la scala supramoleculara; recunoastere si auto-organizare moleculara; dispozitive moleculare; incapsulare moleculara



**Spectrometrul RMN pe solide de 500 MHz / Aplicatii Practice pentru potentiali parteneri interesati de:**

**Determinare de parametri structurali cu rezolutie atomica pentru o gama foarte larga de sisteme moleculare**

**Dinamica moleculara si interactiuni moleculare**

## Materiale avansate

Investigatii structurale de rutina pentru tehnologia materialelor:

Zeoliti

Geluri

Biomateriale

Polimeri



INCDTIM  
Cluj-Napoca

# L7 Laborator de difractometrie de raze X

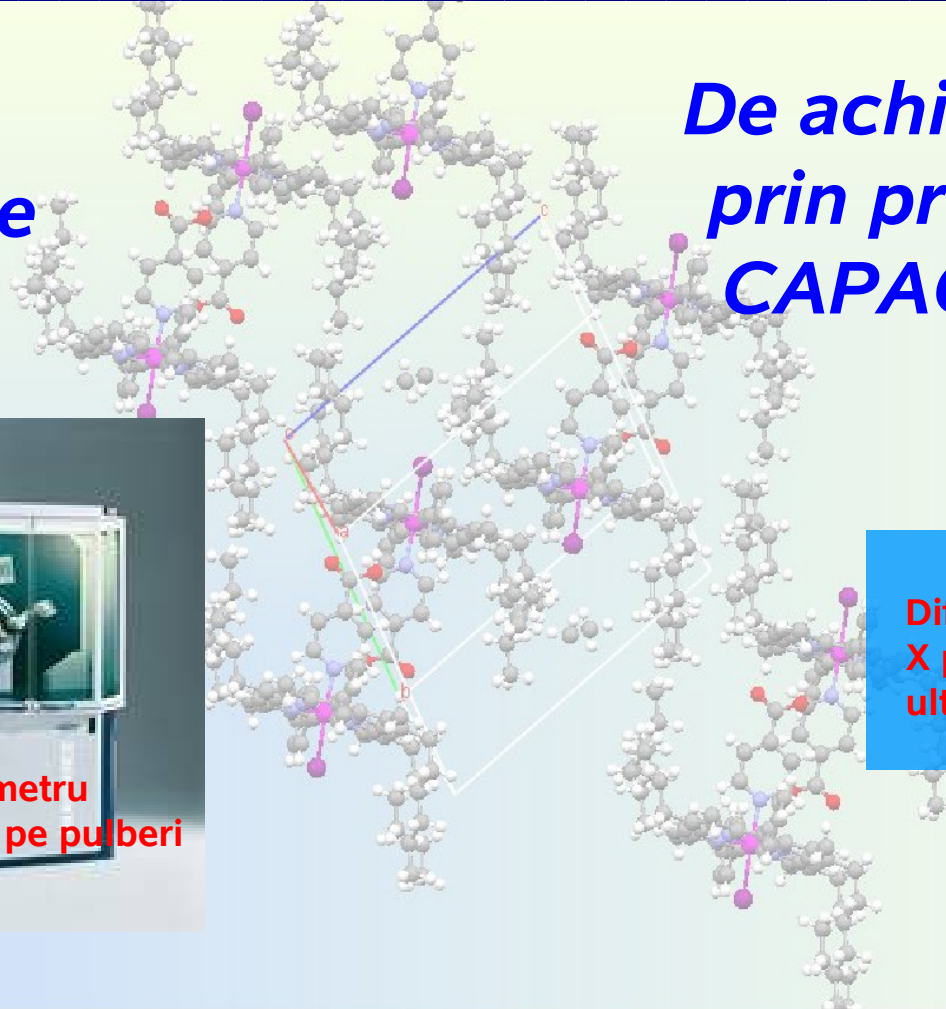
*Dotari  
existente*



Diffractometru  
de raze X pe pulberi

*De achizitionat  
prin proiectul  
CAPACITATI*

Diffractometru de raze  
X pe monocristale  
ultraperformant





# L7 Laborator de difractometrie de raze X

## Difractometru de Raze X pe Monocristale / Performante

**Primul difractometru de raze X pe monocristale din tara cu sursa duala (Mo si Cu)**

**Comutare automata intre radiatia Cu si Mo**



**Nu necesita realinierea sistemului sau reconfigurarea sistemului**





# L7 Laborator de difractometrie de raze X

## Difractometru de Raze X pe Monocristale / Performante

Primul difractometru de raze X pe monocristale din tara cu sursa duala (Mo si Cu)

### Goniometru cu 4 cercuri de tip Kappa



- Rezolutie: mai buna de  $0.0003^\circ$
- Reproductibilitate: mai buna de  $0.005^\circ$
- Acuratete in pozitionare:  $2\theta, \Omega, \kappa = 0.01^\circ; \Phi = 0.015^\circ$



# L7 Laborator de difractometrie de raze X

## Difractometru de Raze X pe Monocristale / Performante

**Primul difractometru de raze X pe monocristale din tara cu sursa duala (Mo si Cu)**

**Detector CCD (62 mm x 62 mm)**

- Rezolutie spatiala: mai buna de 15  $\mu\text{m}$
- FWHM: mai mica de 75  $\mu\text{m}$
- Sensibilitate: cel putin 170 electroni per foton de raze X



# L7 Laborator de difractometrie de raze X

## Difractometru de Raze X pe Monocristale Aplicatii Practice

**Detrminarea structurii  
cristaline si moleculare  
pentru orice compus care  
poate fi preparat sub  
forma de monocristale cu  
dimensiuni ce cel putin zecimi  
de mm**

### Domeniul Farmaceutic

**Determinarea structurii cristaline a substantelor  
biologic active: polimorfi, co-cristale, solvati; hidrati**

**Rational Drug Design: determinarea structurii cristaline a  
complexilor substrat-ligand (ex. proteina-medicament)**



# L7 Laborator de difractometrie de raze X

## Difractometru de Raze X pe Monocristale Aplicatii Practice

**Detrminarea structurii  
cristaline si moleculare  
pentru orice compus care  
poate fi preparat sub  
forma de monocristale cu  
dimensiuni ce cel putin zecimi  
de mm**

Aplicatii Practice

## Proteomica

Determinarea structurii cristaline a proteinelor



# L7 Laborator de difractometrie de raze X

## Difractometru de Raze X pe Monocristale Aplicatii Practice

**Detrminarea structurii  
cristaline si moleculare  
pentru orice compus care  
poate fi preparat sub  
forma de monocristale cu  
dimensiuni ce cel putin zecimi  
de mm**

### Materiale avansate

Determinarea structurii cristaline pentru:

Zeoliti

Supraconductori

Biomateriale

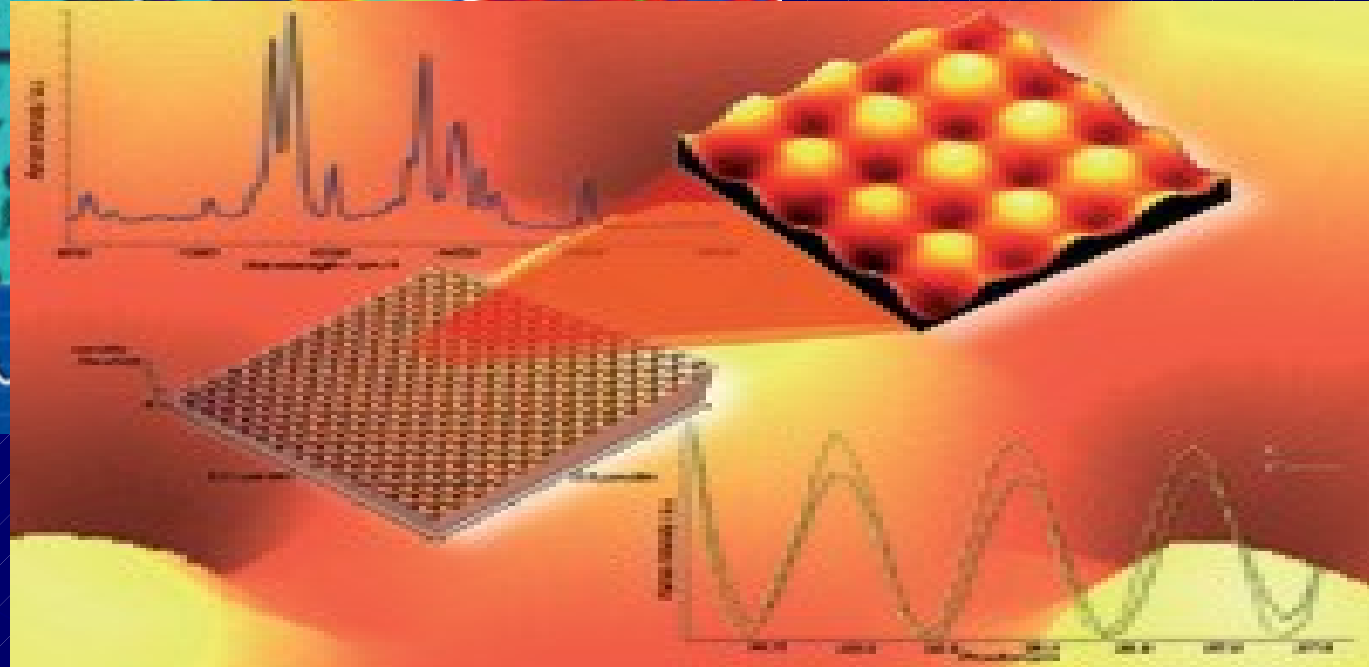
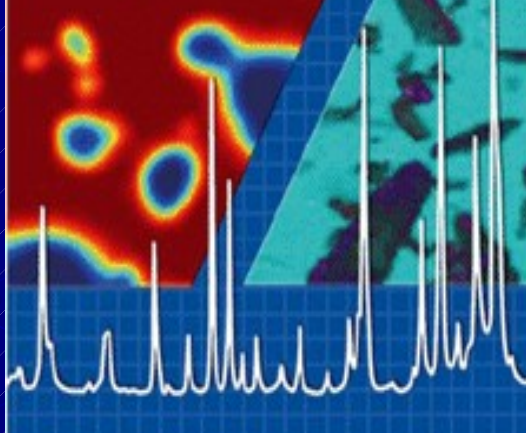
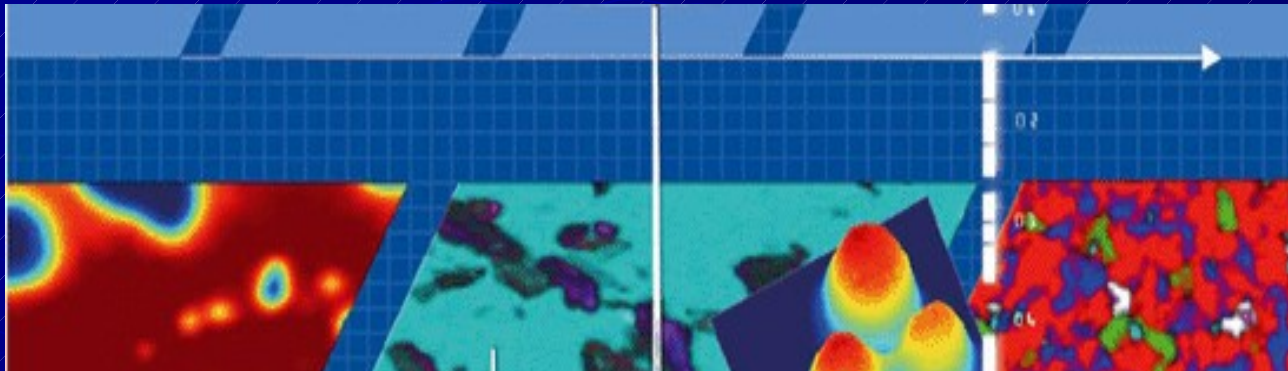
Cristale fotonice, etc.

# L8 Laborator de spectroscopie vibrationala

## *Microspectrometru Raman confocal cu accesorii*



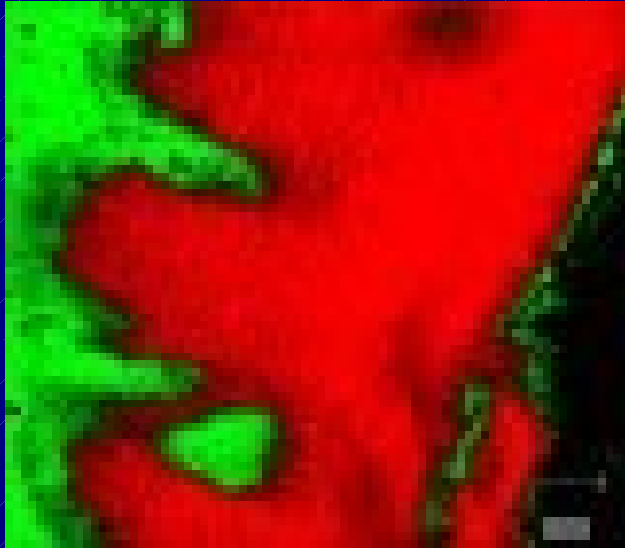
INCDTIM  
Cluj-Napoca



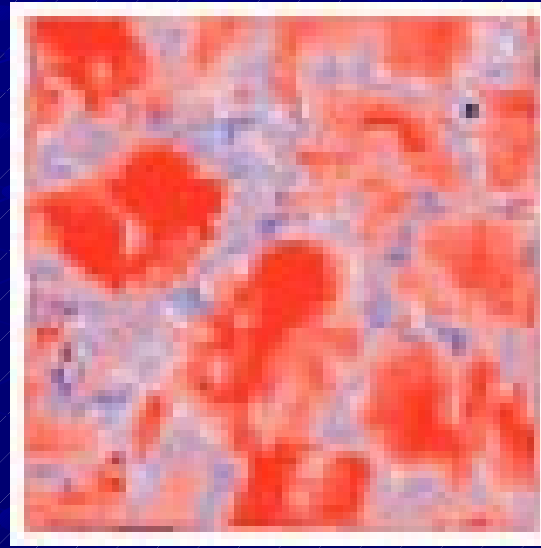
# L8 Laborator de spectroscopie vibrationala

## *Aplicatii Practice / Potentiali Utilizatori*

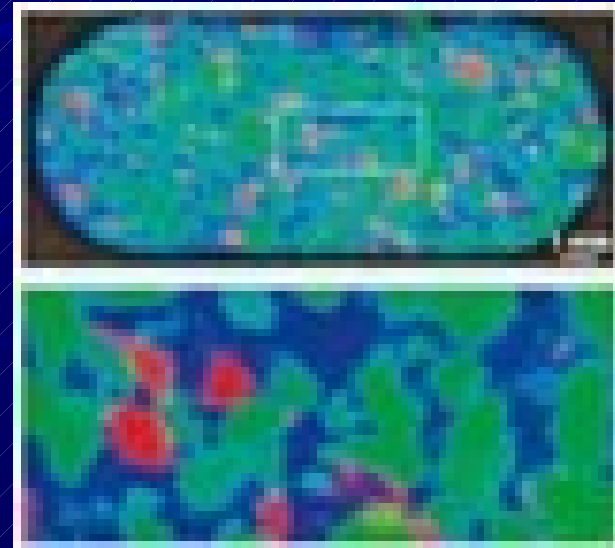
Biomedicale



Stiinta materialelor



Farmaceutice



Nanotehnologie



# L8 Laborator de spectroscopie vibrationala

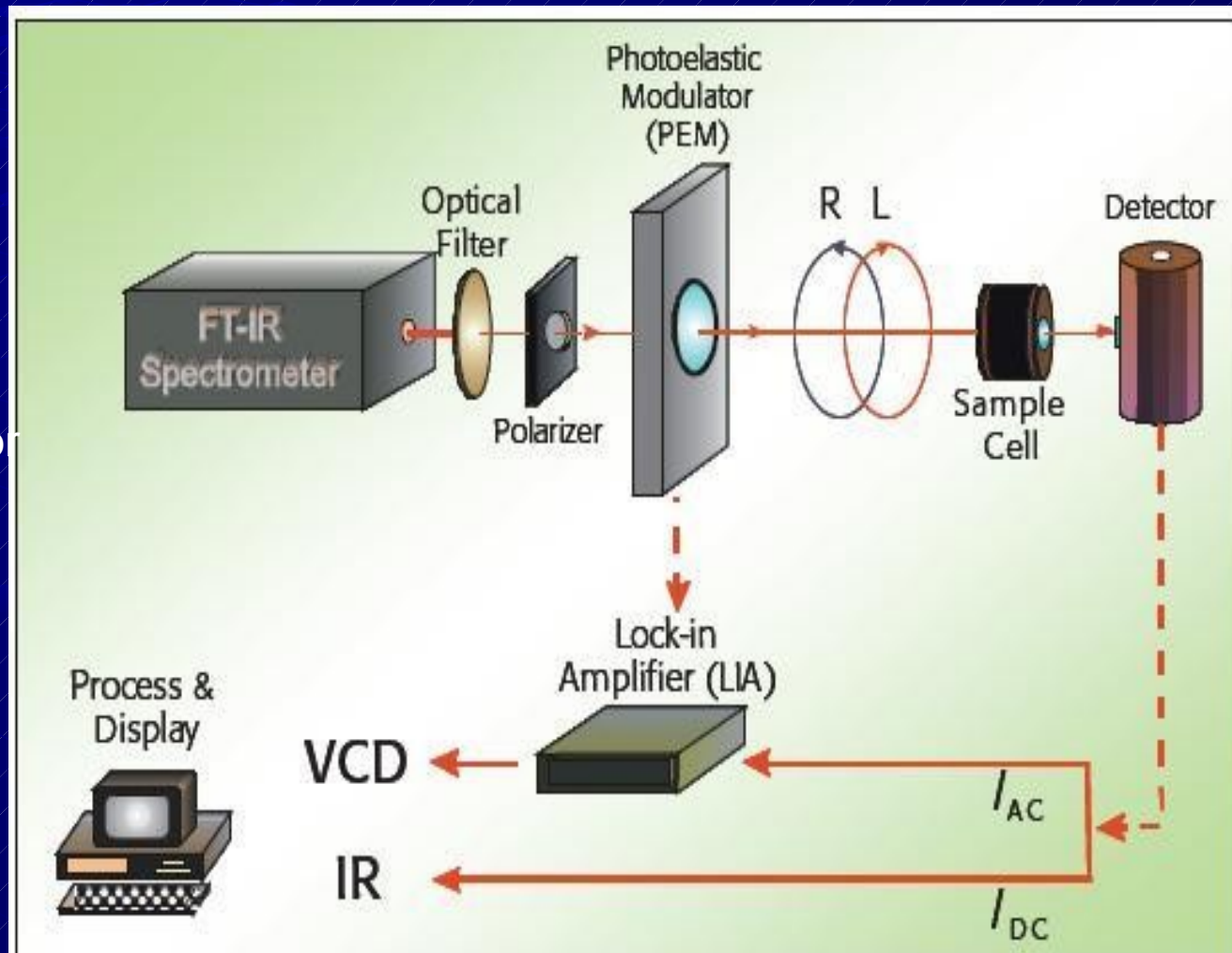


INCDTIM  
Cluj-Napoca

## *Spectrometru de dicroism circular vibrational*

### Informatii

- Informatii structurale,
- Formele chirale ale enantiomerilor compusilor moleculari si biomoleculari,
- Analiza conformationala





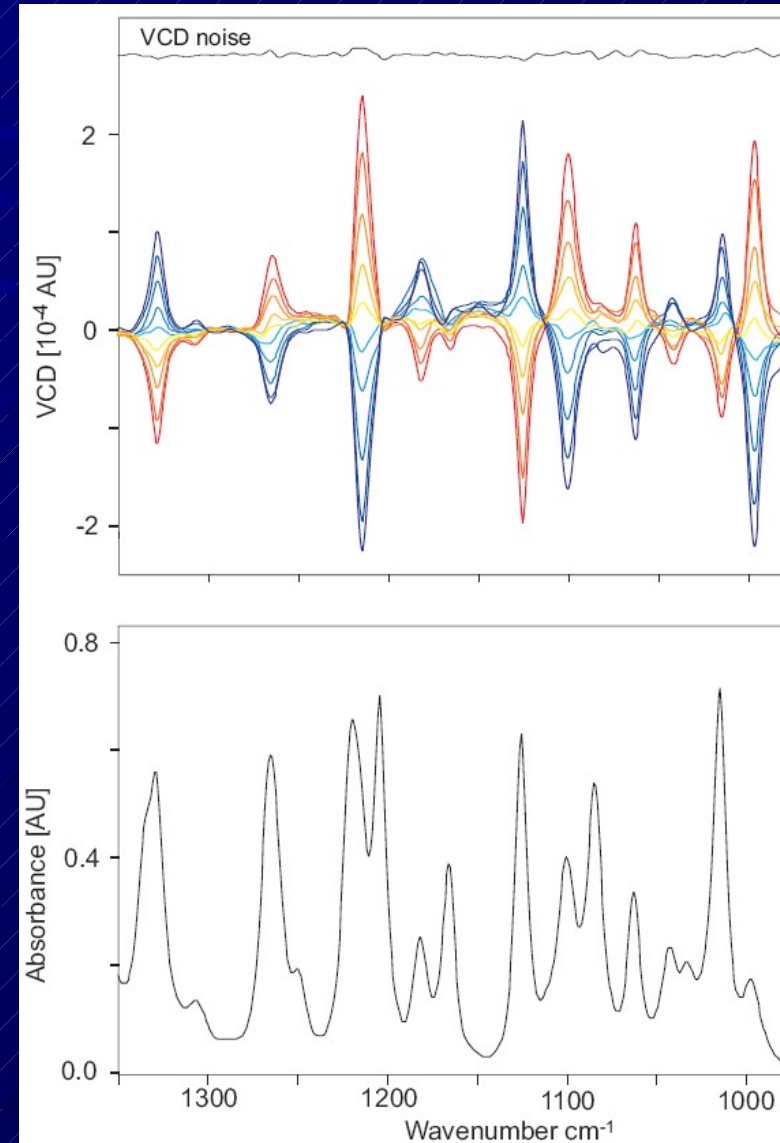
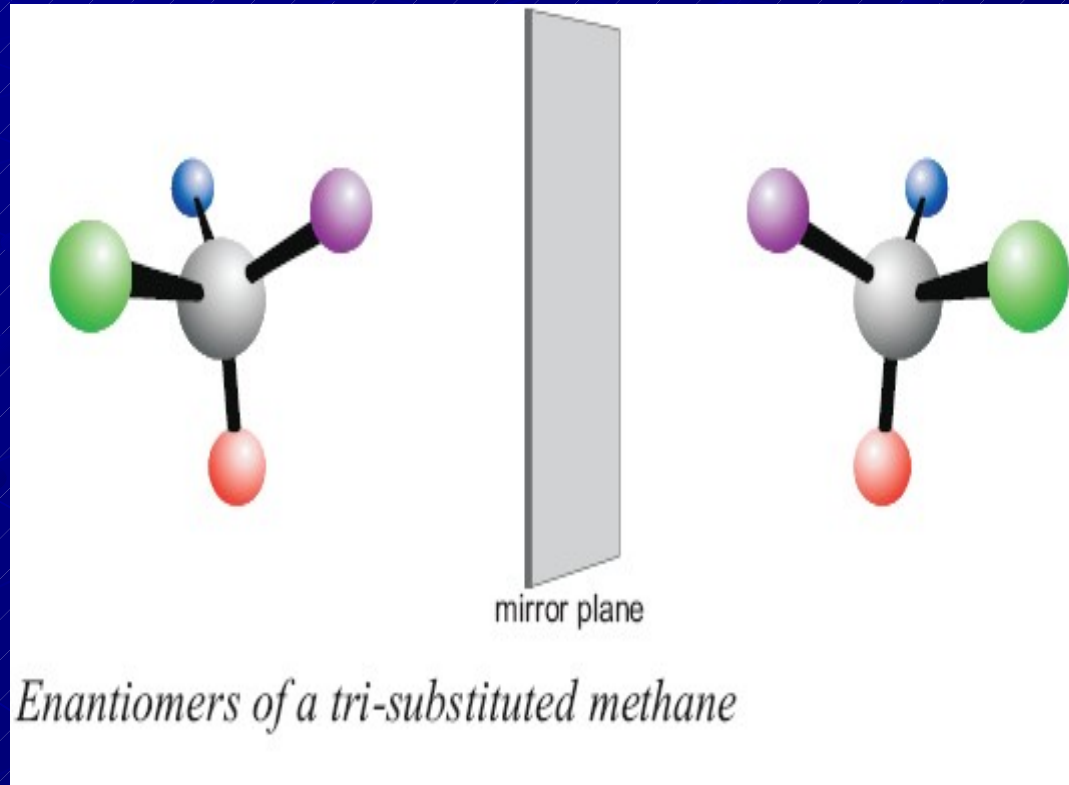
# L8 Laborator de spectroscopie vibrationala

## *Spectrometru de dicroism circular vibrational*



INCDTIM  
Cluj-Napoca

### Enantiomeri



## Echipamente existente



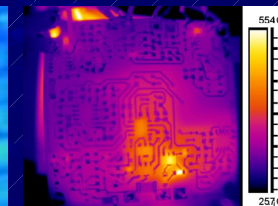
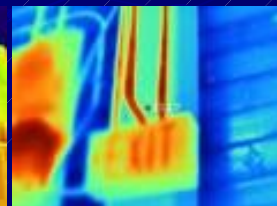
- Tehnici abordate:
  - spectroscopia fotopiroelectrica
  - calorimetrie fotopiroelectrica
- Domenii de aplicabilitate:
  - fizica sistemelor moleculare
  - si izotopice
  - fenomene critice si tranzitii de faza

# L9 Laborator de spectroscopie si calorimetrie fototermica

Camera NIR



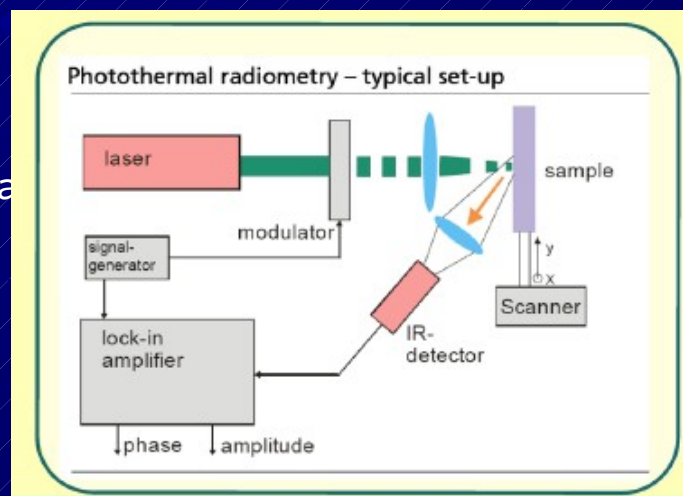
Echipamente de achizitionat



Optomecanica



Electronica pentru prelucrarea semnalelor mici



- Tehnici fototermice abordate:
  - tehnica fotopiroelectrica
  - radiometria fototermica
  - termografia

- Domenii de aplicabilitate:
  - ecologie si protectia mediului
  - industria alimentara
  - medicina si farmacie
  - fizica:
    - sistemelor izotopice si moleculare
    - sistemelor nanostructurate

# L10 Laborator - tehnici de microunde

*Sistem de masura a proprietatilor dielectrice si spectroscopie de microunde in domeniul de frecvente 50MHz-325GHz*

*Se compune din:*

- *Analizor vectorial de retea*
- *Analizor de spectru*
- *Generator de microunde*
- *Powermetru de microunde*



# L10 Laborator - tehnici de microunde



INCDTIM  
Cluj-Napoca

*Sistem proiectare/realizare  
prototipuri electronice de microunde  
prin ablatie LASER cu precizie  $25\mu\text{m}$   
si rezolutie de  $2\mu\text{m}$*

*se compune din:*

- *Plotter cu laser pentru realizarea microstructurilor*
- *Echipament de metalizare treceri*
- *Echipament semiautomat pentru plantat componente SMT*
- *Alte accesorii*



# L10 Laborator - tehnici de microunde



INCDTIM  
Cluj-Napoca

*Se urmareste dobandirea de cunostinte fundamentale si realizare de aplicatii in domeniul de interactie a microundelor cu substanta, avand ca scop:*

- *cercetari fundamentale privind mecanismele de interactie a microundelor in sisteme biologice complexe*
- *metode noi de caracterizare si procesare a sistemelor moleculare si bio-moleculare complexe, tratamente neconventionale in camp de microunde pentru obtinerea de: materiale noi, tehnologii de tratament economice,*
- *traductori pentru caracterizarea unor procese*
- *metode de avertizarea si reducere supra poluarii electromagnetice*

*Sistemul reprezinta o nouate pe plan national si zonal prin :*

- *domeniu de frecvete de microunde abordat*
- *posibilitatea de realizare a circuitelor prototip in acest domeniul de microunde*



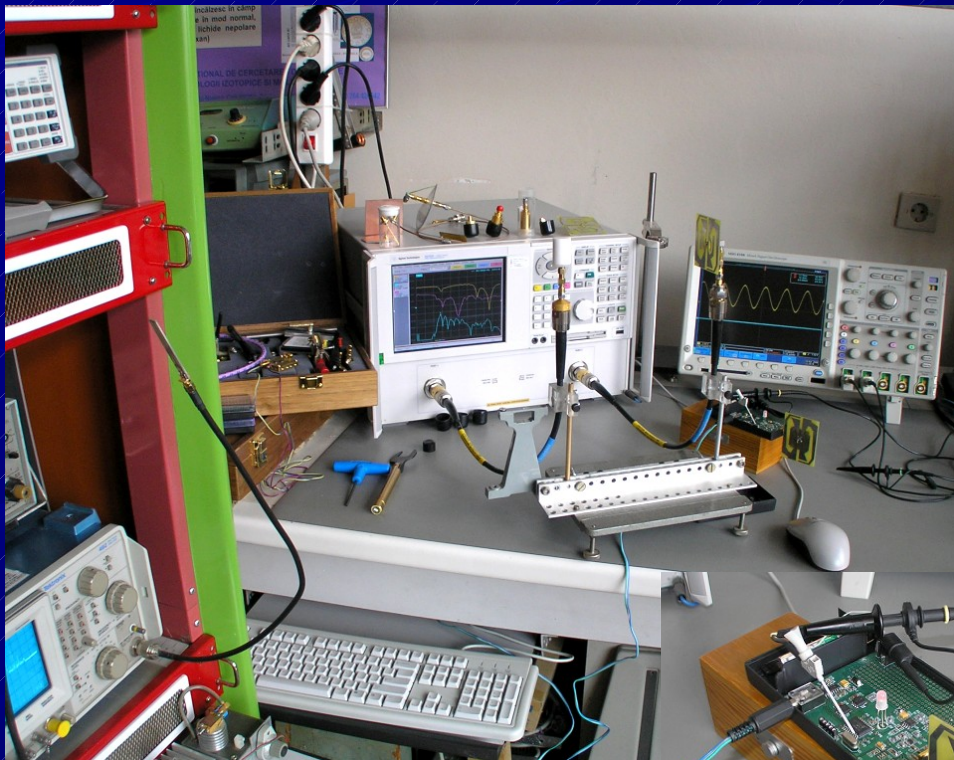
# L10 Laborator - tehnici de microunde



INCDTIM  
Cluj-Napoca

*Deservirea echipamentelor va fi realizata de o echipa interdisciplinara de specialisti din domeniile de electronica, fizica, chimie si fizica tehnologica cu urmatoarele rezultate in domeniul de cercetare:*

- realizare de aplicatii in procesarea substantei in camp de microunde de putere
- măsurători de proprietăți electrice și magnetice în domeniul de microunde
- aplicații de traductori de microunde și instalații de tratament



- publicatii stiintifice
- brevete de inventii medaliate  
la saloane internationale
- aparatura de cercetare realizata

**MDFMOLBIO**  
**4 DECEMBRIE**  
**2008**

# Echipa de implementare

## MDFMOLBIO



**Dr. Ioan TURCU**  
Şef Departament  
Fizică Moleculară și  
Biomoleculară  
**Director proiect**



**Ing. Dumitru CHINCIȘAN**  
Şef Compartiment Mecano-Energetic și  
Investiții  
**Responsabil achiziții**



**Ec. Diana NICOARĂ**  
Director Economic  
**Responsabil  
economico-financiar**



**Dr. Radu  
BRĂTFĂLEAN**  
Cercetător științific  
**Coordonator proiect**



**Dr. Diana BOGDAN**  
Cercetător științific  
**Responsabil cu activități  
de  
informare și publicitate**



# Mulțumirile noastre

Finantatorului



**ANCES**

**Autoritatea Națională pentru Cercetare Științifică**

Colaboratorilor



**F.M. MANAGEMENT CONSULTANCY**

Studiul de fezabilitate

# Sponsori ai Evenimentului de Deschidere



## RomTech

SIBIU: Str. Marius Sturza nr. 5A;  
Tel/Fax: 0269 233482; 0269 233465;  
romtech@directnet.ro  
BUCUREȘTI: B-dul Burebista nr. 1; Bl.  
D15/28;  
Tel/Fax: 021 3272294; 021 3272295; Tel:  
021 3204842; romlabor@rdslink.ro



## ABL & E - JASCO

SEDIUL CENTRAL: Calea Turzii 161;  
400495 Cluj-Napoca;  
Tel/Fax: 0264 594286; mobil: 0744 787  
803;  
BIROU BUCUREȘTI: OP 78 CP 100;  
062600 București;  
Tel/Fax: 021 2201403; www.ablelab.com;  
ablerom@ablelab.com