

**RAPORT FINAL DE ACTIVITATE  
privind desfășurarea programului-nucleu  
TEHNOLOGII, MATERIALE ȘI PRODUSE SUSTENABILE / TEMAPS, cod PN 16 14**

**Durata programului: 2 ani**

**Data începerii: 15.03.2016**

**Data finalizării: 20.12.2017**

**1. Scopul programului:**

In conformitate cu Strategia INCEMC pe perioada 2015 – 2020 scopul Programului **TEHNOLOGII, MATERIALE ȘI PRODUSE SUSTENABILE / TEMAPS** este optimizarea și integrarea pe verticală a cercetării științifice și aplicării tehnologice, în sensul satisfacerii ciclului de cercetare-dezvoltare-inovare: (nano)materiale inteligente/sustenabile (materie condensată, electrochimie aplicată, senzori) ⇒ sisteme foto-electro-chimice sustenabile/energie durabilă (baterii, celule solare îmbunătățite, deopotrivă în principiu structural cât și în cel integrat/funcțional/design, etc.). În cadrul evoluției actuale și de perspectivă a pieței energetice, a reducerii ponderii combustibililor fosili pe fondul reducerii cantitative a acestora și a problemelor legate de poluarea pe care o generează, un accent tot mai mare se pune pe **sursele de energie regenerabilă**. În acest context, ne vom concentra atenția asupra celor trei resurse majore: energia geotermală, energia solară și eoliană.

Inaugurarea în cadrul INCEMC Timișoara a Laboratorului de Cercetare pentru Energii Regenerabile – Fotovoltaic a creat condiții optime pentru **sinteză și caracterizarea de noi materiale** cu potențial ridicat de conversie directă a energiei solare în energie electrică. Includem aici și dezvoltarea de celulele fotovoltaice integrate în elementele de construcție. Aceasta direcție a devenit prioritară în cadrul INCEMC Timișoara.

In contextul actual în care încălzirea planetei – ca urmare a activității umane în principal, duce la modificări semnificative ale climei (și nu în sensul bun), la reducerea stratului protector de ozon, la creșterea impactului fenomenelor extreme etc. – se suprapune peste poluarea tot mai greu de stăpânit din centrele urbane, cu impact puternic asupra sănătății locuitorilor, peste reducerea continuă a suprafeței pădurilor – adevărați „plămâni ai Terrei” – implicarea INCEMC Timișoara în probleme de reducere a impactului activității umane asupra **mediului înconjurător** este inevitabilă.

**2. Modul de derulare al programului:**

**2.1. Descrierea activităților** (utilizând și informațiile din rapoartele anuale)

**Obiectivul PN 16 14 01. ENERGIE** are în vedere studiul unor aspecte privind: sinteza hidrotermala de nanotuburi și nanobare de  $TiO_2$ , cat și a materialelor cu structura stratificată de tip  $ABO_2$  ( $A= Li, Na, B= Co, Cr și Mn$ ); sinteza și caracterizarea microparticulelor de magnetită poroasă și fabricarea suporturilor hibride magnetice de tip polimer/particulă anorganică pentru photocatalizatori calcogenici activi în vizibil; studiul bibliografic și actualizarea datelor științifice privind obținerea și caracterizarea materialelor piezoelectrice flexibile.

Dezvoltarea acestor direcții conduce la rezolvarea și finalizarea următoarelor tematici:

- studiul bibliografic al bateriilor solare reincarcabile obținute prin integrarea unor celule solare sensibilizate cu colorant (DSSCs) de tip  $n$  și a unei baterii cu electrolit apă pe baza de  $Li$  și  $Na$ ;
- proiecte de tehnologii de laborator pentru obținerea de nanotuburi și nanobare de  $TiO_2$ , cat și a materialelor cu structura stratificată de tip  $A(Li, Na)B(Co, Cr, Mn)O_2$ ;

- nanotuburi si nanobare de  $TiO_2$ , cat si a materialelor cu structura stratificata de tipul  $A(Li, Na)B(Co, Cr, Mn)O_2$ ;
- tehnologia hidrotermala de obtinere a nanotuburilor si nanobarelor de  $TiO_2$ , cat si a materialelor cu structura stratificata de tipul  $A(Li, Na)B(Co, Cr, Mn)O_2$ ;
- sintetizarea materialelor  $FeCO_3$ ,  $Fe_3O_4$  si  $Fe_2O_3$  prin metoda hidrotermala asistata de microunde si respectiv prin descompunerea termica in mediu controlat;
- caracterizarea materialelor obtinute prin tehnici ca: microscopie electronica de transmisie, spectroscopie de raze x dispersiva in energie, difractie de raze x, microscopie electronica cu scanare, spectrometrie Raman, spectrometrie UV-VIZ de reflectanta difusa, spectrometrie FTIR, termogravimetrie, analiza termica diferentiala si porozimetrie;
- studiu bibliografic al bateriilor solare reincarcabile obtinute prin integrarea unor celule solare sensibilizate cu colorant (DSSCs) de tip  $n$  si a unei baterii cu electrolit apos pe baza de Li si Na;
- proiecte de tehnologii de laborator pentru obtinerea de nanotuburi si nanobare de  $TiO_2$ , cat si a materialelor cu structura stratificata de tipul  $A(Li, Na)B(Co, Cr, Mn)O_2$ ;
- nanotuburi si nanobare de  $TiO_2$ , cat si a materialelor cu structura stratificata de tipul  $A(Li, Na)B(Co, Cr, Mn)O_2$ ;
- tehnologia hidrotermala de obtinere a nanotuburilor si nanobarelor de  $TiO_2$ , cat si a materialelor cu structura stratificata de tipul  $A(Li, Na)B(Co, Cr, Mn)O_2$ ;
- înglobarea nanoparticulelor magnetice sintetizate in polimetacrilat de metil si obtinerea de filme subtiri avand grosimea mai redusa de 10 micrometri care se pot prezenta ca suport ieftin pentru incarcare cu photocatalizator;
- sinteza si caracterizarea photocatalizatorilor de tip  $PdS/CdS/ZnS$ ;
- fabricarea suporturilor hibride magnetice de tip polimer/particula anorganica pentru suportarea photocatalizatorilor calcogenici activi in vizibil;
- suportarea photocatalizatorilor pe suporturi cu proprietati magnetice;
- experimente de fotocataliza utilizand sulfuri binare suportate si nesuportate;
- realizarea unui setup experimental compus din sursa monocromatica de lumina, corp al fotoreactorului si benzi polimerice incarcate cu photocatalizator;
- actualizarea datelor bibliografice cu privire la obtinerea materialelor piezoelectrice flexibile „prietenoase” mediului;
- prezentarea si descrierea metodelor de caracterizare ale materialelor piezoelectrice flexibile;
- descrierea modelului electric de convertire a energiei mecanice in energie electrica, utilizind piezoelemente flexibile;
- metode de laborator optimizate pentru obtinerea materialelor piezoelectrice fara plumb, pe baza de Niobat de Sodiu si Potasiu modificat cu perovskiti de tipul  $GdBBO_3$  si  $SmBO_3$  ( $B=Co, Mn, Cr, Fe, Al$ ), utilizati la fabricarea piezoelementelor flexibile;
- identificare si discutii asupra tranzitiilor de faza cristalina observate in cazul doparilor studiate;
- determinarea parametrilor celulei elementare pentru materialele studiate;
- noi proiecte de cercetare-dezvoltare in cadrul planului national sau programe ale UE, pe baza rezultatelor stiintifice obtinute;
- participare la retelele de cercetare interne si internationale;
- publicarea unor lucrari in reviste de specialitate din tara si din strainatate.

În cadrul acestui obiectiv au fost abordate următoarele proiecte:

➤ **PN 16 14 01 01. Realizarea unor baterii solare reincarcabile pe baza de materiale cu structura stratificata obtinute prin metoda hidrotermala.** Acesta a avut în componența lui etapa:

- Sinteza hidrotermala de nanotuburi si nanobare de  $TiO_2$ , cat si materiale cu structura stratificata de tipul  $ABO_2$  ( $A= Li, Na, B= Co, Cr si Mn$ )

- Realizarea unei baterii solare reincarcabile prin integrarea unei celule solare sensibilizate cu colorant (DSSCs) de tip n si a unei baterii cu electrolit apos pe baza de Li

În etapele derulate s-au realizat următoarele activități:

- Studiu bibliografic al bateriilor solare reincarcabile obtinute prin integrarea unor celule solare sensibilizate cu colorant (DSSCs) de tip n si a unei baterii cu electrolit apos pe baza de Li si Na.
- Proiecte de tehnologii de laborator pentru obtinerea de nanotuburi si nanobare de  $TiO_2$ , cat si a materialelor cu structura stratificata de tipul A(Li, Na)B(Co,Cr,Mn)O<sub>2</sub>;
- Nanotuburi si nanobare de  $TiO_2$ , cat si a materialelor cu structura stratificata de tipul A(Li, Na)B(Co,Cr,Mn)O<sub>2</sub>;
- Tehnologia hidrotermala de obtinere a nanotuburilor si nanobarelor de  $TiO_2$ , cat si a materialelor cu structura stratificata de tipul A(Li, Na)B(Co,Cr,Mn)O<sub>2</sub>;
- Studiu bibliografic al bateriilor solare reincarcabile obtinute prin integrarea unor celule solare sensibilizate cu colorant (DSSCs) de tip n si a unei baterii cu electrolit apos pe baza de Li si Na.
- Proiecte de tehnologii de laborator pentru obtinerea de nanotuburi si nanobare de  $TiO_2$ , cat si a materialelor cu structura stratificata de tipul A(Li, Na)B(Co,Cr,Mn)O<sub>2</sub>;
- Nanotuburi si nanobare de  $TiO_2$ , cat si a materialelor cu structura stratificata de tipul A(Li, Na)B(Co,Cr,Mn)O<sub>2</sub>;
- Tehnologia hidrotermala de obtinere a nanotuburilor si nanobarelor de  $TiO_2$ , cat si a materialelor cu structura stratificata de tipul A(Li, Na)B(Co,Cr,Mn)O<sub>2</sub>;

➤ **PN 16 14 01 02. Micropulberi magnetice pentru descompunerea fotocatalitică a apei cu ajutorul luminii solare.** Acesta a avut în componența lui etapa:

- Sinteză și caracterizarea microparticulelor de magnetită poroasă și fabricarea suporturilor hibride magnetice de tip polimer/particulă anorganică pentru fotocatalizatori calcogenici activi în vizibil
- Sinteză și caracterizarea fotocatalizatorilor calcogenici suportați pe samburi magnetică și nesuportați

În etapele derulate s-au sintetizat materialele  $FeCO_3$ ,  $Fe_3O_4$  si  $Fe_2O_3$  prin metoda hidrotermala asistată de microunde și respectiv prin descompunerea termică în mediu controlat.

S-au caracterizat materialele prin tehnici ca: microscopie electronica de transmisie, spectroscopie de raze X dispersiva în energie, difracție de raze X, microscopie electronica cu scanare, spectrometrie Raman, spectrometrie UV-VIZ de reflectanță difuză, spectrometrie FTIR, termogravimetrie, analiza termică diferențială și porozimetrie.

În urma acestor caracterizări complexe s-au tras următoarele concluzii:

- Condițiile optime de sinteza a carbonatului feros sunt pH neutru sau usor acid (pH = 5-7), absența oxigenului din sistem și un raport echimolar carbonat :  $Fe^{2+}$ .
- Domeniul de temperatură în care are loc descompunerea carbonatului feros în mediu inert (vacuum sau argon) este cuprins între 350 și 450 °C.
- Natura amorfă a carbonatului extinde domeniul de descompunere până la 560 °C la tratamentul termic în aer însă prima etapă de descompunere se realizează la temperaturi mai reduse decât a materialului cristalin.
- Nanoparticulele magnetice sintetizate s-au inglobat în polimetacrilat de metil și s-au obținut filme subțiri având grosimea mai redusă de 10 micrometri care se pot prezenta ca suport ieftin pentru încarcare cu fotocatalizator.

Proiectul a urmarit sinteza și caracterizarea fotocatalizatorilor de tip PdS/CdS/ZnS, fabricarea suporturilor hibride magnetice de tip polimer/particulă anorganică pentru suportarea fotocatalizatorilor calcogenici activi în vizibil, suportarea fotocatalizatorilor pe suporturi cu proprietăți magnetice și experimente de fotocataliză utilizând sulfuri binare suportate și nesuportate. Pentru aceasta au fost fabricate suporturi magnetice de tip

M-PMMA/AI, M-PMMA, M-PMMA/PP/răsină, M-PMMA (b), M-PMMA/fibră sticlă, unde M este magnetită nanocrystalina. Deoarece utilizarea nanoparticulelor magnetice absorb radiația vizibilă în același domeniu spectral în care absorb și particulele de photocatalizator, zonele de cuplaj magnetic al particulelor de magnetită și de descărcare a hidrogenului au fost separate spațial prin utilizarea unor benzi polimerice. Acestea pot fi ușor reciclate și reintroduse în proces după epuizarea photocatalizatorului. Datorită separării spațiale ale nanoparticulelor conținând fier și a celor conținând zinc, cadmiu și paladiu, procesul reciclarii poate fi mult mai simplu, sulfurile fiind dizolvate cu ajutorul unui acid tare (sulfuric sau azotic) și reprecipitate cu ajutorul ionilor sulfură fără necesitatea unei separări. Au fost de asemenea fabricați photocatalizatori de tip ZnS/CdS/PdS aceștia fiind caracterizați complex prin microscopie electronică de trasmisie, microscopie electronică cu scanare, difracție de raze X, spectroscopie de raze X dispersivă în energie, spectroscopie în infraroșu cu transformată Fourier și spectroscopie de fotoluminescentă. De asemenea s-au efectuat experimente de photocataliză pe photocatalizatori dispersați în soluție și pe cei depuși pe suporturi magnetice polimerice, având diverse grade de încărcare cu paladiu.

Ca performante realizate putem aminti realizarea benzilor polimerice pe baza de polimetacrilat de metil cu grosime de doar cativa micrometri care au in componenta particule magnetice. Pe aceste benzi polimerice, la finalul proiectului au fost depusi photocatalizatori calcogenici activi in vizibil. Pentru evaluarea eficienței acestui sistem a fost realizat un setup experimental compus din sursa monocromatică de lumina, corpul fotoreactorului si benzi polimerice incarcate cu photocatalizator. S-au prezentat in cadrul proiectului doua lucrari la conferinte de profil si s-a trimis spre publicare o lucrare stiintifica intr-o revista internationala cotata ISI. In acest moment lucrarea este acceptata spre publicare. A fost de asemenea depus la Oficiul de Stat pentru Invenții și Mărci o cerere de brevetare.

➤ **PN 16 14 01 03. Piezoelemente flexibile fara plumb destinate producerii energiei electrice.** Acesta a avut în componența lui etapa:

- Studiu bibliografic si actualizarea datelor științifice privind obtinerea si caracterizarea materialelor piezoelectrice flexibile
- Elaborarea unei metode de laborator optimizate pentru obtinerea piezoelementelor flexibile fara plumb

In etapele derulate au fost realizate cu succes urmatoarele activitati:

- au fost actualizate datele bibliografice cu privire la obtinerea materialelor piezoelectrice flexibile „prietenoase” mediului;
- au fost prezentate si descrise metodele de caracterizare ale materialelor piezoelectrice flexibile;
- a fost descris modelul electric de convertire a energiei mecanice in energie electrica, utilizind piezoelemente flexibile;
- au fost elaborate metode de laborator optimizate pentru obtinerea materialelor piezoelectrice fara plumb, pe baza de Niobat de Sodiu si Potasiu modificat cu perovskiti de tipul GdB<sub>3</sub>O<sub>3</sub> si SmB<sub>3</sub> (B=Co, Mn, Cr, Fe, Al), utilizati la fabricarea piezoelementelor flexibile.
- au fost identificate si discutate tranzitiile de fază cristalina observate in cazul doparilor studiate
- au fost determinati parametrii celulei elementare pentru materialele studiate.
- experienta castigata fost valorificata printr-o propunere de proiect internationala COST Open Call: OC-2017-1-22156, cu statutul de membru in echipa propulsorului secundar.

**Obiectivul PN 16 14 02. MEDIU,** are în vedere studiul unor aspecte privind: influența polifenolilor naturali din vinuri asupra vitezei de coroziune a oțelurilor; obtinerea si caracterizarea unor noi materiale hibride pe baza de carbune activ si nano-dioxid de titan nedopat/dopat; evaluarea capacitatii de adsorbție si photocataliza pentru indepartarea acidului humic (HA) din apa utilizand materialele hibride selectate pe baza caracterizarilor morfo-

structurale; experimente preliminare de obținere a nanomaterialelor și obținerea nanomaterialelor oxidice; realizarea de filme subțiri monostrat și de filme subțiri nanostructurate de tip sandwich; studiul aspectelor teoretice privind parametrii de obținere a filmelor subțiri oxidice epitaxiale și aplicațiile acestora; realizarea unui studiu de literatură referitor la situația actuală a metodelor de extracție și analiză a reziduurilor de pesticide din cereale și alimente; documentare științifică asupra lucrarilor în domeniu și a evoluției înregistrate în știință și industrie referitoare la hidrogen pe post de catalizator pentru reducerea emisiilor de tip "PM" în gazele de esapament la motoarele cu Combustie Internă (CI); calculul DFT/HF și analiza EHT pentru oxizi delafositici de tip  $\text{ABO}_2$ , corelații între structura compușilor naturali și acțiunea inhibitoare în procesul de ionizare a metalelor din oțeluri; determinarea vitezei de coroziune a oțelurilor în vinuri autohtone; elaborarea unei proceduri de selecționare a oțelurilor pentru confecționarea aparatelor și utilajelor din industria vinului, în vederea reducerii vitezei de coroziune, a conținutului de metale grele în vinuri și a impactului asupra mediului și a sănătății oamenilor; optimizarea proceselor de adsorbție și fotocataliza pentru îndepărțarea acidului humic (HA); integrarea proceselor avansate de adsorbție/fotocatalitic utilizând materiale hibride în cadrul tehnologiei de tratare a apei; optimizarea parametrilor/tehnologiilor de obținere nanomateriale oxidice și optimizarea proceselor de obținere a filmelor subțiri; obținerea și caracterizarea de filme subțiri epitaxiale oxidice de oxid de staniu de diferite grosimi; recoltare probe de sol din zona Banat - Timiș, după administrarea pesticidelor; metode de izolare și concentrare a pesticidelor; analize și metode de identificare; prelevare de probe de grâu, porumb, rapiță din recolta proaspătă; izolare și concentrare de pesticide; analize pesticide; comparare concentrații de pesticide în sol și cereale; prelevare de probe de grâu, porumb din recolta stocată în silozuri; dezvoltare experimentală a standului de testare și construirea echipamentelor; calcul DFT/HF și analiza EHT pentru solutii solide  $\text{CdS}/\text{ZnS}/\text{SeS}$ ; studiul literaturii de specialitate în vederea determinării celor mai nocivi poluanți atmosferici din mediul urban; studiul de literatură al procesului de epurare a apei prin electrocoagulare și proiectarea unei instalații de laborator pentru epurarea apei utilizând panouri fotovoltaice flotante.

Dezvoltarea acestor direcții conduce la rezolvarea și finalizarea următoarelor tematici:

- demonstrarea posibilității de utilizare a resveratrolului ca inhibitor de coroziune;
- obținerea unor date referitoare la vitezele de coroziune ale otelului carbon și a otelului inoxidabil în soluții sintetice în prezența și în absența resveratrolului;
- sinteza materialelor hibride pe baza de carbure activ și nano-dioxid de titan nedopat și dopat cu ioni de argint (Ag) prin metode conventionale (sol-gel, hidrotermal clasic) și neconventionale (hidrotermal în camp de microunde);
- analiza morfologică și elementala a materialelor obținute prin microscopie electronică de baleiaj;
- testarea materialelor hibride selectate în urma caracterizării acestora, în procesele de adsorbție și fotocataliza pentru îndepărțarea materiei organice de tipul acizilor humici din apă;
- evaluarea comparativă a eficienței fotocatalitice și de adsorbție a unor materiale hibride pe baza de carbure activ pulbere și sub formă granulată, funcționalizat cu particule de  $\text{TiO}_2$  aplicate în procesul de degradare a acidului humic;
- obținerea materialelor nanostructurate de tip oxizi pseudo-binari  $\text{Mgx}(\text{Ta}_{1-y-z}\text{Nb}_y)\text{O}_w$  unde  $x=1, 3; y=0, 33, 0, 1, 0, 05, 1; z=0, 33, 0, 1, 0, 05, 1; w=6, 8$  cu proprietăți anticorozive utilizând metoda din stare solidă și metoda hidrotermală;
- realizarea filmelor subțiri monostrat și a filmelor subțiri nanostructurate de tip sandwich folosind nanomateriale de tip  $\text{Mgx}(\text{Ta}_{1-y-z}\text{Nb}_y)\text{O}_w$  unde  $x=1, 3; y=0, 33, 0, 1, 0, 05, 1; z=0, 33, 0, 1, 0, 05, 1; w=6, 8$  obținute prin metoda hidrotermală și metoda din stare solidă;
- obținerea filmelor subțiri prin două metode: PLD și drop-casting;
- elaborarea unui studiu asupra tehniciilor de depunere a filmelor subțiri oxidice cu diverse aplicații, precum și a proprietăților materialelor de depus;
- studiul aplicațiilor filmelor ce urmează a fi depuse prin tehnica PLD;

- studiu de literatură referitor la situația actuală a metodelor de extractie și analiză a reziduurilor de pesticide din cereale și alimente;
- studiu de documentare științifica referitor la lucrările în domeniu și evoluția înregistrată în știință și industrie urmărind avantajele economice și de creștere a performanțelor mecanice (putere marita și consum redus), pentru a înțelege mai bine mecanismul de funcționare al sistemului;
- studiul variantelor constructive și avantajele/dezavantajele diferitelor tipuri de electrolizor folosite pentru obținerea hidrogenului, pentru a alege varianta optima de proiectare și construcție a modelului experimental;
- realizarea de calcule DFT preliminare utilizând un pachet soft CRYSTAL14, precum și operații de standardizare a celulei elementare a unor compusi delafositici de tip  $ABO_2$  ( $FeCuO_2$ ,  $GaCuO_2$ ,  $CrCuO_2$ );
- calcularea structurilor de benzi energetice, densitatea de stări electronice pe fiecare atom al retelelor cristaline, densitatile de sarcina electronice;
- reducerea vitezei de coroziune a oțelurilor utilizate în procesele de vinificatie;
- reducerea conținutului de metale grele în vinuri și a impactului asupra mediului și a sănătății oamenilor.
- obținerea și caracterizarea unor noi materiale hibride „low cost” cu proprietăți avansate de adsorbție/fotocataliza;
- dezvoltarea unui nou concept de tratare avansata a apei pentru potabilizare;
- noi materiale care pot folosite cu succes în procesele de adsorbție și fotocataliza pentru îndepărtarea compusilor organici de tipul acizilor humici din apă;
- demonstrarea viabilității efectului dioxidului de titan în prezența luminii UV asupra suprafetei carbunelui activ pulbere asigurând activitatea de autocurătare, facându-l astfel potrivit pentru tratarea avansata a apei potabile în timpul proceselor de fotocataliza;
- realizarea prin sinteza din stare solidă și sinteza prin metoda hidrotermală în anumite condiții de noi nanomateriale cu structura oxidică pseudo-binara de tip  $Mg_x(Ta_{1-y-z}Nb_y)_2O_w$  unde  $x=1, 3; y=0, 0.33, 0.1, 0.05, 1; z=0, 0.33, 0.1, 0.05, 1; w=6, 8$ ;
- obținerea filmelor subțiri de tip monostrat și / sau sandwich;
- testarea filmelor subțiri ca inhibitori de coroziune în mediu salin sau acid;
- demonstrarea protecției anticorozive în cazul tuturor electrozilor modificati prin depunerile de filme subțiri;
- demonstrarea faptului că tensiunea din filmele subțiri de  $SnO_2$  de diferite grosimi, poate fi o modalitate eficientă de a stabili diferențele care apar în valoarea benzii interzise a acestora;
- demonstrarea faptului că deformarea este o modalitate eficientă de a controla deplasarea de bandă a filmelor de  $SnO_2$  și sugerează că ingineria deformatiei este o cale atrăgătoare pentru a controla proprietățile optice ale semiconducțorilor de oxid;
- obținerea filmelor subțiri oxidice epitaxiale - de o importanță extraordinară datorită aplicabilității promițătoare a acestora într-o gamă largă de domenii tehnologice, inclusiv cele optice, electronice, optoelectronice și biologice;
- studiul și determinarea concentrațiilor unor erbicide și insecticide prin diverse metode în câteva cereale cultivate în Banat: grâu, porumb, rapiță;
- studiul patentelor de inventii și a diverselor lucrari experimentale din mediul academic și non-academic și a lucrărilor care urmăresc avantajele economice și de creștere a performanțelor mecanice (putere marita și consum redus), pentru a înțelege mai bine mecanismul de funcționare al sistemului;
- studiul variantelor constructive și a avantajelor/dezavantajelor diferitelor tipuri de electrolizor folosite pentru obținerea hidrogenului, pentru a alege varianta optima de proiectare și construcție a modelului experimental;
- finalizarea fazei de concept, proiectare, detaliere și achiziția unor componente necesare pentru construcția și montajul instalației experimentale;
- realizarea unui studiu bibliografic cuprinzător și relevant pentru identificarea celor mai nocivi poluanți din zonele urbane caracterizate de trafic intens ;

- determinarea condițiilor experimentale optime pentru identificarea densității volumetrice a particulelor (PM) existente într-o zonă urbană caracterizată de trafic intens ;
- ilustrarea unei harti 3D a poluanților identificați, cu ajutorul programelor software specifice prelucrării datelor de acest tip ;
- elaborarea unui studiu amanuntit referitor la epurarea apelor uzate prin electrocoagulare folosind electrozi de aluminiu;
- proiectarea sistemului de electrocoagulare pentru epurarea apelor uzate;
- contributii la dezvoltarea unui Laborator de Chimie-Fizica Structurala și Computationala
- editarea material didactic de initiere în tehnici de analiza quanto-chimica prin utilizarea softului CRYSTAL 14 pentru calcule *ab initio*.
- realizarea calculelor pentru o serie de proprietati de material, pentru structuri delafositice FeCuO<sub>2</sub>/GaCuO<sub>2</sub>/CrCuO<sub>2</sub> precum si ZnS/CdS.
- noi proiecte de cercetare-dezvoltare în cadrul planului national sau programe ale UE, pe baza rezultatelor științifice obținute;
- participare la rețele de cercetare interne și internaționale;
- publicarea unor lucrări în reviste de specialitate din țară și din străinătate.

În cadrul acestui obiectiv au fost abordate următoarele proiecte:

- **PN 16 14 02 01. Coroziunea otelurilor în vinuri. Influenta polifenolilor naturali asupra vitezei de coroziune a otelurilor utilizate în procesele de vinificatie.** Acesta a avut în componența lui etapele:
  - Influența polifenolilor naturali din vinuri asupra vitezei de coroziune a oțelurilor
  - Corelații între structura compușilor naturali și acțiunea inhibitoare în procesul de ionizare a metalelor din oțeluri
  - Determinarea vitezei de coroziune a oțelurilor în vinuri autohtone
  - Elaborarea unei proceduri de selecționare a oțelurilor pentru confecționarea aparatelor și utilajelor din industria vinului, în vederea reducerii vitezei de coroziune, a conținutului de metale grele în vinuri și a impactului asupra mediului și a sănătății oamenilor

Au fost realizate următoarele activități:

- Demonstrarea posibilității de utilizare a resveratrolului ca inhibitor de coroziune.
- Obținerea unor date referitoare la vitezele de coroziune ale otelului carbon și a otelului inoxidabil în soluții sintetice în prezența și în absența resveratrolului.
- Rezultatele obținute arată că valorile vitezelor de coroziune în vinurile testate pentru OLC 45 sunt apropiate de limita maxima admisă, ceea ce înseamnă că acest tip de otel nu poate fi folosit la confecționarea aparatelor și utilajelor de procesare și depozitare a vinurilor. Dimpotrivă, vitezele de coroziune pentru otelul AISI 304L sunt extrem de reduse, în toate vinurile analizate, fapt care demonstrează că pot fi folosite atât la procesarea, cât și la depozitarea vinurilor.
- Forma voltamogramelor este tipică soluțiilor alcoolice, în care la polarizare anodică are loc oxidarea alcoolului concomitent cu degajarea oxigenului, iar la polarizare catodică, se desfășoară reacția de degajare a hidrogenului. Nu sunt evidențiate picuri de reducere care să semnaleze prezența unor depolarizanți pentru procesul de coroziune.
- Micrografiile SEM prezentate arată că suprafața otelului inox AISI 304L nu suferă transformări sub acțiunea vinurilor în timp ce proba din otel carbon OL45 este corodată.
- Reducerea vitezei de coroziune a oțelurilor utilizate în procesele de vinificatie
- Reducerea conținutului de metale grele în vinuri și a impactului asupra mediului și a sănătății oamenilor.

- **PN 16 14 02 02. Obținerea și testarea unor materiale hibride inovative cu cost scăzut, utilizate în procesele avansate de tratare a apei.** Acesta a avut în componența lui etapele:

- Obtinerea si caracterizarea unor noi materiale hibride pe baza de carbune activ si nano-dioxid de titan nedopat/dopat
- Evaluarea capacitatii de adsorbție si fotocataliza pentru indepartarea acidului humic (HA) din apa utilizand materialele hibride selectate pe baza caracterizarilor morfo-structurale
- Optimizarea proceselor de adsorbție si fotocataliza pentru indepartarea acidului humic (HA)
- Integrarea proceselor avansate de adsorbție/fotocatalitic utilizand materiale hibride in cadrul tehnologiei de tratare a apei

S-a urmarit sinteza materialelor hibride pe baza de carbune activ si nano-dioxid de titan nedopat si dopat cu ioni de argint (Ag) prin metode conventionale (sol-gel, hidrotermal clasic) si neconventionale (hidrotermal in camp de microunde). Pentru analiza morfologica si elementala a materialelor obtinute a fost utilizata microscopia electronica de baleaj. Imaginele SEM si spectrele EDAX au fost realizate cu ajutorul unui Microscop Electronic Inspect S FEI Company, Olanda. Studiul structurii cristaline al materialelor hibride utilizate in studiu s-a realizat cu difractometrul PANalytical X'Pert Pro MPD, cu tub anodic de cupru si detector PixCEL. Prelucrarea datelor in vederea determinarii structurii materialului si identificarii fazelor cristaline a fost efectuată cu programele X'pert HighScore Plus, FullProf Suite (WinPLOTR) si OriginPro 7.5. Spectrele de reflexie difusa au fost inregistrate cu ajutorul unui spectrofotometru tip UV-Vis-NIR Lambda 950 cu modulul URA (Universal Reflectance Accessory), acestea au fost convertite din reflectanta in absorbant prin ecuatie Kubelka-Munk. Morfologia materialelor hibride a fost studiata si cu ajutorul microscopului de forta atomica - tip Nanosurf® EasyScan 2 Advanced Research AFM.

S-a urmarit testarea materialelor hibride selectate in urma caracterizarii acestora, in procesele de adsorbție si fotocataliza pentru indepartarea materiei organice de tipul acizilor humici din apa.

Obiectul prezentei faze a avut ca scop evaluarea comparativa a eficientei fotocatalitice si de adsorbție a unor materiale hibride pe baza de carbune activ pulbere si sub forma granulata, functionalizat cu particule de TiO<sub>2</sub> aplicate in procesul de degradare a acidului humic. Testele experimentale care au vizat procesele de adsorbție si fotocataliza eterogena au avut loc sub agitare magnetica, continua la temperatura de 20 °C, intr-un reactor fotocatalitic RS-1 tip Heraeus. Pentru experimentele de adsorbție si fotocataliza care au avut loc sub iradiere in vizibil in domeniul UV, lampa de lucru a fost imbracata intr-o camasa de quart. Un sistem de recirculare a apei a mentinut temperatura solutiei constanta (20° C) pe toata durata experimentelor.

Cercetarile efectuate in cadrul acestui studiu au urmarit obtinerea si caracterizarea unor noi materiale hibride „low cost” cu proprietati avansate de adsorbție/fotocataliza care au urmarit dezvoltarea unui nou concept de tratare avansata a apei pentru potabilizare. Rezultatele promitatoare obtinute in urma caracterizarilor morfologice si structurale ale materialele hibride sintetizate prin metode conventionale si neconventionale, fac ca aceste materiale sa poata fi folosite cu succes in procesele de adsorbție si fotocataliza pentru indepartarea compusilor organici de tipul acizilor humici din apa. Deasemenea a fost demonstrata viabilitatea efectului dioxidului de titan in prezenta lumинii UV asupra suprafetei carbunelui activ pulbere asigurand activitatea de autocuratare, facandu-l astfel potrivit pentru tratarea avansata a apei potabile in timpul proceselor de fotocataliza.

➤ PN 16 14 02 03. Obtinerea si caracterizarea fizico-chimica a filmelor subtiri folosind materiale de tip

**Mg<sub>x</sub>(Ta<sub>1-y-z</sub>Nb<sub>y</sub>)<sub>2</sub>O<sub>w</sub>** cu proprietati anticorozive. Acesta a avut in componența lui etapele:

- Experimente preliminare de obtinere nanomateriale
- Obtinere nanomateriale oxidice. Realizarea de filme subtiri monostrat si de filme subtiri nanostructurate de tip sandwich
- Optimizarea parametrilor / tehnologiilor de obtinere nanomateriale oxidice si optimizarea proceselor de obtinere a filmelor subtiri

In prima etapa s-au obtinut materiale nanostructurate de tip oxizi pseudo-binari  $Mg_x(Ta_{1-y-z}Nb_y)2O_w$  unde  $x=1, 3; y=0, 0.33, 0.1, 0.05, 1; z=0, 0.33, 0.1, 0.05, 1; w=6, 8$  cu proprietati anticorozive utilizand metoda din stare solida si metoda hidrotermala.

- Studiu bibliografic al materialelor utilizate pentru aplicatii anticorozive;
- Proiecte de tehnologii de laborator pentru obtinerea materialelor de tip oxizi pseudo-binari  $Mg_x(Ta_{1-y-z}Nb_y)2O_w$  unde  $x=1, 3; y=0, 0.33, 0.1, 0.05, 1; z=0, 0.33, 0.1, 0.05, 1; w=6, 8$  cu proprietăți de inhibare a coroziunii;
- Noi materiale nanostructurate de tip oxizi pseudo-binari  $Mg_x(Ta_{1-y-z}Nb_y)2O_w$  unde  $x=1, 3; y=0, 0.33, 0.1, 0.05, 1; z=0, 0.33, 0.1, 0.05, 1; w=6, 8$ ;
- Tehnologia realizarii sintezei in stare solida a materialelor nanostructurate de tip oxizi pseudo-binari  $Mg_x(Ta_{1-y-z}Nb_y)2O_w$  unde  $x=1, 3; y=0, 0.33, 0.1, 0.05, 1; z=0, 0.33, 0.1, 0.05, 1; w=6, 8$ ;
- Tehnologia hidrotermala de obtinere a materialelor nanostructurate de tip oxizi pseudo-binari  $Mg_x(Ta_{1-y-z}Nb_y)2O_w$  unde  $x=1, 3; y=0, 0.33, 0.1, 0.05, 1; z=0, 0.33, 0.1, 0.05, 1; w=6, 8$ .

In etapa a doua s-au realizat filme subțiri monostrat și de filme subțiri nanostructurate de tip sandwich folosind nanomateriale de tip  $Mg_x(Ta_{1-y-z}Nb_y)2O_w$  unde  $x=1, 3; y=0, 0.33, 0.1, 0.05, 1; z=0, 0.33, 0.1, 0.05, 1; w=6, 8$  obtinute prin metoda hidrotermală și metoda din stare solida. Filmele subtiri au fost obtinute prin doua metode: PLD si drop-casting.

- Studiu bibliografic asupra metodelor de obtinere a filmelor subiri;
- Obtinerea filmelor subiri prin metoda PLD folosind nanomaterialelor de tip oxizi pseudo-binari  $Mg_x(Ta_{1-y-z}Nb_y)2O_w$  unde  $x=1, 3; y=0, 0.33, 0.1, 0.05, 1; z=0, 0.33, 0.1, 0.05, 1; w=6, 8$
- Obtinerea filmelor subiri prin metoda drop-casing folosind nanomaterialelor de tip oxizi pseudo-binari  $Mg_x(Ta_{1-y-z}Nb_y)2O_w$  unde  $x=1, 3; y=0, 0.33, 0.1, 0.05, 1; z=0, 0.33, 0.1, 0.05, 1; w=6, 8$
- Caracterizarea morfologica a acestor filme subiri

In cadrul acestui proiect s-au realizat prin sinteza din stare solida si sinteza prin metoda hidrotermala in anumite conditii noi nanomateriale cu structura oxidica pseudo-binara de tip  $Mg_x(Ta_{1-y-z}Nb_y)2O_w$  unde  $x=1, 3; y=0, 0.33, 0.1, 0.05, 1; z=0, 0.33, 0.1, 0.05, 1; w=6, 8$ . S-au obtinut filme subiri de tip monostrat si / sau sandwich folosind doua metode de depunere: drop-casting si PLD. Aceste filme subtri au fost testate ca inhibitori de coroziune in mediu salin sau acid. Pentru toti electrozii modificati prin depunerile de filme subiri a fost aratat ca acestea ofera protectie anticoroziva, fiecare dintre aceasta prezintand un factor de inhibare al coroziunii de peste 55%.

➤ **PN 16 14 02 04. Dezvoltarea unor noi materiale necesare in energetica si mediu.** Aceasta a avut în componenta lui etapele:

- Aspecte teoretice privind parametrii de obtinere a filmelor subțiri oxidice epitaxiale și aplicațiile acestora
- Obținerea și caracterizarea de filme subțiri epitaxiale oxidice de oxid de staniu de diferite grosimi

În cadrul primei etape a prezentului proiect a fost elaborat un studiu asupra tehniciilor de depunere a filmelor subțiri oxidice cu diverse aplicatii, precum si a proprietatilor materialelor ce urmeaza a fi depuse. S-au enumerat aplicatiile ale filmelor ce urmeaza a fi depuse prin tehnica PLD. Obiectivul de faza a fost indeplinit si s-a realizat un raport de cercetare.

În urma celei de-a doua etape: s-au efectuat cercetări privind proprietăatile structurale, morfologice și optice ale unor filme de  $SnO_2$  de grosimi diferite depuse pe substraturi de  $Al_2O_3$  și  $SrTiO_3$  prin tehnica PLD. Filmele au crescut epitaxial pe substraturile monocristaline, având o înaltă calitate structurală și rugozitate foarte scăzute ale suprafețelor ( $0,1 - 0,2\text{nm}$ ); s-a constatat că filmele sunt parțial tensionate de-a lungul celor două axe în planul rețelei, iar tensiunea de relaxare are loc cu o creștere a grosimii filmului, care are ca rezultat eliberarea unei tensiuni compresive în planul *oop*; există o dependență liniară între valoarea energiei benzii

interzise a filmelor și tensiunea din film în planul *oop*. O tensiunea compresivă de 1% reduce banda interzisă cu aproximativ 0,38 eV. Rezultatele experimentale au fost comparate cu calculele teoretice DFT publicate anterior și s-au dovedit a fi în concordanță. Aceste studii au demonstrat faptul că tensiunea din filmele subțiri de SnO<sub>2</sub> de diferite grosimi, poate fi o modalitate eficientă de a stabili diferențele care apar în valoarea benzii interzise a acestora. Acest studiu demonstrează că deformarea este o modalitate eficientă de a controla deplasarea de bandă a filmelor de SnO<sub>2</sub> și sugerează că ingineria deformatiei este o cale atrăgătoare pentru a controla proprietățile optice ale semiconductorilor de oxid. Filmele subțiri oxidice epitaxiale sunt de o importanță extraordinară datorită aplicabilității promițătoare a acestora într-o gamă largă de domenii tehnologice, incluzând cele optice, electronice, optoelectronice și biologice.

➤ **PN 16 14 02 05. Determinarea unor pesticide din cereale cultivate în Banat.** Aceasta a avut în componența lui etapele:

- Elaborarea unui studiu actualizat de literatură
- Recoltare probe de sol din zona Banat - Timiș, după administrarea pesticidelor. Metode de izolare și concentrare a pesticidelor. Analize și metode de identificare
- Prelevare de probe de grâu, porumb, rapiță din recolta proaspătă. Izolare și concentrare de pesticide. Analize pesticide. Comparare concentrații de pesticide în sol și cereale
- Prelevare de probe de grâu, porumb din recolta stocată în silozuri. Analize de pesticide

În cadrul primei etape a fost realizat un studiu de literatură referitor la situația actuală a metodelor de extracție și analiză a reziduurilor de pesticide din cereale și alimente, prezentat în această fază. În laboratoarele INCEMC au fost efectuate deja încercări pentru determinarea unor reziduuri de pesticide, pe probe de porumb și grâu din siloz (2015), zona Cârpiniș - Jimbolia, prin metode clasice GC-MS și HPLC.

În urma următoarelor etape s-au constatat următoarele: pesticidele sunt substanțe chimice toxice administrate pentru distrugerea plantelor și animalelor dăunătoare. Clasificarea lor se poate face după *grupe de dăunători*: insecticide - combat insectele, acaricide - folosite la combaterea paianjenilor, moluscicide - folosite la combaterea moluștelor, nematocide - folosite la combaterea nematozilor, rodenticide - folosite la combaterea rozătoarelor, larvicide - folosite la combaterea larvelor sau *după modul de acțiune*: insecticide de contact, de ingestie, fumigante, cu persistență sau activitate reziduală și insecticide cu eficacitate adițională, apoi fungicide și fungistatice - folosite la combaterea fungiilor, erbicidele - folosite la combaterea buruienilor, regulatori de creștere, defoliante, deflorante, repelente; proiectul a propus studiul și determinarea concentrațiilor unor erbicide și insecticide prin **diverse metode** în câteva cereale cultivate în Banat: grâu, porumb, rapiță. Obiectivele propuse au fost pe deplin realizate.

➤ **PN 16 14 02 06. Hidrogenul pe post de catalizator pentru reducerea emisiilor de tip "PM" în gazele de esapament la motoarele cu Combustie Internă (CI).** Aceasta a avut în componența lui etapele:

- Documentare științifica asupra lucrarilor în domeniu și a evoluției înregistrate în știință și industrie
- Dezvoltare experimentală a standului de testare și construirea echipamentelor

În etapa de documentare științifica asupra lucrarilor în domeniu și a evoluției înregistrate în știință și industrie s-a realizat:

- studiul publicațiilor științifice relate cu tema de cercetare, patente de inventii și diversele lucrări experimentale din mediul non-academic asupra subiectului, cât și lucrari care urmaresc avantajele economice și de creștere a performanțelor mecanice (putere marita și consum redus), pentru a înțelege mai bine mecanismul de funcționare al sistemului.

- de asemenea au fost studiate variantele constructive și avantajele/dezavantajele diferitelor tipuri de electrolizor folosite pentru obținerea hidrogenului, pentru a alege varianta optimă de proiectare și construcție a modelului experimental.

A fost finalizata faza de informare si documentare cu privire la stadiul cercetari academice si industriale in domeniu, formata in principal din activitati teoretice de studiu a publicatiilor stiintifice relationate cu tema de cercetare. De asemenea au fost studiate patente de inventii si diversele lucrari experimentale din mediul non-academic asupra subiectului si lucrari care urmaresc avantajele economice si de crestere a performantelor mecanice (putere marita si consum redus), pentru a intinge mai bine mecanismul de functionare al sistemului. De asemenea au fost studiate variantele constructive si avantajele/dezvantajele diferitelor tipuri de electrolizor folosite pentru obtinerea hidrogenului, pentru a alege varianta optima de proiectare si constructie a modelului experimental. De asemenea a fost finalizata faza de concept, proiectare, detaliere si achizitia unor componente necesare pentru constructia si montajul instalatiei experimentale.

➤ **PN 16 14 02 07. Analiza computationala si modelarea predictiva a materialelor pe baza de oxid delafositic  $\text{ABO}_2$  si de solutii solide de tip wurtzit  $\text{CdS}/\text{ZnS}$ .** Acesta a avut în componența lui etapele:

- Calcul DFT/HF si analiza EHT pentru oxizi delafositici de tip  $\text{ABO}_2$
- Calcul DFT/HF si analiza EHT pentru solutii solide  $\text{CdS}/\text{ZnS}/\text{SeS}$

In cadrul proiectului a fost utilizat pachetul CRYSTAL14, pe un system Dell cu processor dual core Intel i9, HDD 500 GB la 7200 rpm, RAM DE 2 GB. Programul CRYSTAL14 opereaza cu doua tipuri de fisiere input, cu extensiile \*.d12 respectiv \*.d3. Prima extensie marcheaza fisierul pentru calculul iterativ de optimizare a structurilor iar a doua se refera la calculul proprietatilor materialului.

Fisierele aferente proprietatilor electronice, structurii de benzi, densitate de stari, proiectiei densitatii de stari sunt redate in forma monocroma de tip \*.eps. Din acest motiv a fost folosit si un program de vizualizare a rezultatelor DL Visualize.

Au fost efectuate calcule DFT preliminare utilizand un pachet soft CRYSTAL14, precum si operatii de standardizare a celulei elementare a unor compusi delafositici de tip  $\text{ABO}_2$  ( $\text{FeCuO}_2$ ,  $\text{GaCuO}_2$ ,  $\text{CrCuO}_2$ ). Au fost calculate structurile de benzi energetice, densitatea de stari electronice pe fiecare atom al retelelor cristaline, densitatile de sarcina electronice.

S-au avut in vedere contributii la dezvoltarea unui Laborator de Chimie-Fizica Structurala si Computationala; editarea unui material didactic de initiere in tehnici de analiza quanto-chimica prin utilizarea softului CRYSTAL 14 pentru calcule *ab initio*. S-au facut calcule pentru o serie de proprietati de material, pentru structuri delafositice  $\text{FeCuO}_2$  /  $\text{GaCuO}_2/\text{CrCuO}_2$  precum si  $\text{ZnS}/\text{CdS}$ .

➤ **PN 16 14 02 09. Biosistem hibrid de imbunatatire a calitatii aerului urban.** Acesta a avut în componența lui etapa:

- Studiul literaturii de specialitate în vederea determinării celor mai nocivi poluanți atmosferici din mediul urban
  - Realizarea studiului determinativ al celor mai nocivi poluanți atmosferici prezenti în zonele urbane, este bazat, în primă fază, pe literatura de specialitate. În cadrul primei etape a proiectului, s-au determinat particule din clasa PM-urilor corelate cu incidente crescute de cancer pulmonar, afectiuni cardio vasculare și o înaltă rată a morbidității:  $\text{PM}_{2.5}$  cu dimensiunile  $0.3 \mu\text{m}$ ,  $0.5 \mu\text{m}$ ,  $1 \mu\text{m}$ , și  $\text{PM}_{10}$  cu dimensiunile cuprinse între  $2.5 \mu\text{m}$  și  $10 \mu\text{m}$ . Densitatea volumetrică a PM-urilor existente într-o zonă urbană caracterizată de trafic relativ intens a fost realizată cu succes. Harta tridimensională relevă creșterea concentrației particulelor mai mici de  $0.3 \mu\text{m}$  odată cu creșterea înălțimii de colectare, de la aproximativ  $4.47 \text{ milioane}/\text{m}^3$  aer la nivelul solului la  $5.04 \text{ milioane}/\text{m}^3$  aer la  $5 \text{ m}$  înălțime. De asemenea, au fost colectate date atât în direcție perpendiculară pe benzile rutiere cât și în direcție longitudinală. Concentrația particulelor  $\text{PM}_{2.5}$  scade odată cu îndepărarea de marginea drumului situată lângă clădiri având înălțimea mai mare de  $10 \text{ m}$ . Această scădere se observă doar pentru înălțimile de colectare de  $0.1$  și  $2.5 \text{ m}$ . Pentru înălțimea de  $5 \text{ m}$ , scăderea concentrației nu mai este evidentă. Se consideră

că efectul se datorează curenților turbionari de aer formați în proximitatea clădirilor. Datorită faptului că distanța dintre clădire și cea mai apropiată bandă rutieră este mai mare de 5 m, cel mai probabil curenții turbionari se formează datorită vântului și nu datorită trecerii autoturismelor.

- Ca performante realizate putem aminti efectuarea unui studiu bibliografic cuprinzător și relevant pentru identificarea celor mai nocivi poluanți din zonele urbane caracterizate de trafic intens. De asemenea, s-au determinat condițiile experimentale optime pentru identificarea densității volumetrice a particulelor (PM) existente într-o zonă urbană caracterizată de trafic intens. În plus s-a ilustrat harta 3D a poluanților identificați, cu ajutorul programelor software specifice prelucrării datelor de acest tip.

➤ **PN 16 14 02 10. Sistem modular adaptabil pentru epurarea apelor uzate.** Acesta a avut în componența lui etapa:

- Studiul de literatură al procesului de epurare a apei prin electrocoagulare și proiectarea unei instalații de laborator pentru epurarea apei utilizând panouri fotovoltaice flotante

Obiectivul fazei 1 a fost îndeplinit în totalitate. S-a elaborat un studiu amanuntit în ceea ce privește epurarea apelor uzate prin electrocoagulare folosind electrozi de aluminiu. Deasemenea, proiectarea sistemului electrocoagulare a fost pe deplin finalizată.

Rezultatele acestui proiect și experiența dobândită vor putea fi utilizate pentru elaborarea de noi proiecte de cercetare, pentru stabilirea de noi contacte științifice și colaborări la nivel internațional, pentru atragerea de fonduri private sau europene, pentru dezvoltarea colaborării în domeniul cu agenții economici interesați.

**Obiectivul PN 16 14 03. MATERIALE, PROCESE ȘI PRODUSE INOVATIVE,** are în vedere studiul unor aspecte privind: caracterizarea, calculul și măsurarea bi-grafenelor cu defecte topologice pentru nanomateriale în sensibilizarea foto-electrochimică; obținerea și caracterizarea de filme subțiri de SnO<sub>2</sub> și de oxid de wolfram obținute prin ablație laser prin tehnica implantării de ioni de heliu de energie joasă; studii bibliografice privind obținerea filmelor subțiri multi-strat de TiO<sub>2</sub>/WO<sub>3</sub> prin metode alternative; proiectarea metodelor de obținere a filmelor subțiri de TiO<sub>2</sub>/WO<sub>3</sub>; sinteza materialelor de tipul ABO<sub>3</sub> cu structura perovskitica nedopate și dopate cu ioni metalici (Al, Cu, Ti, etc) prin tehnologia ceramica și metoda sol-gel urmată de tratamente termice la diferite temperaturi, urmată de studiul proprietăților fizico-chimice; Studiul stabilității termice a antocianinelor pure pe parcursul încălzirii și depozitării; Obținerea și caracterizarea microparticulelor de carbonat de fier cu structură monocristalina și cu dimensiuni controlate, dezvoltarea unor instalații noi de sinteza; obținerea de magnetita mezocristalina prin tratamentul termic controlat al monocristalelor de carbonat de fier; caracterizarea proprietăților fizice (magnetizatie, structura cristalina, porozitate); sinteza în câmp cu microunde a hidroxibenzamidelor, esterilor, hidrazidelor, hidrazoneelor și caracterizarea acestora; modelarea, designul, și controlul bi-punctelor cuantice (quantum double-dots/bondots) transportate în sisteme fotovoltaice cu bi-grafene; studiu aprofundat bazat pe posibile aplicatii ale filmelor astfel obținute; obținerea filmelor subțiri de TiO<sub>2</sub> pe substraturi diferite prin metode avansate și caracterizarea structurală și morfologică a acestora; sinteza materialelor de tipul ABO<sub>3</sub> cu structura perovskitica nedopate și dopate cu ioni metalici (Al, Cu, Ti, etc) prin metoda hidrotermală asistată ultrasonic și hidrotermală în camp de microunde; studiul proprietăților fizico-chimice; optimizarea metodelor de sinteza în vederea obținerii de materiale cu structura perovskitica multifuncțională; evaluarea efectului temperaturii asupra antocianinelor din materiale vegetale (legume și/sau fructe) pe parcursul încălzirii și depozitării; studiul influenței unor cofactori în vederea găsirii de soluții pentru creșterea stabilității antocianinelor; obținerea de maghemita (prin tratamentul termic al magnetitei) prin tratamentul termic al magnetitei obținute; caracterizarea proprietăților fizice (magnetizatie, structura cristalina, porozitate); evaluarea capacitatii antioxidantie a compusilor sintetizați utilizând metode chimice și electrochimice; sinteza și caracterizarea complecșilor derivati hidroxibenzamidic-ciclodextrină;

dezvoltarea de senzori pentru determinarea 8-hidroxi-2'-deoxiguanozina și 8-nitroguanina; obținerea de materiale luminescente și doparea lor cu ioni ai lantanidelor; aspecte teoretice privind stadiul actual al extracției și utilizării compușilor organici bioactivi cu sulf; studiu de literatură asupra derivațiilor porfirinici și a metodelor de investigare a agregatelor cu caracter porfirinic, atât în soluții cât și pe substraturi solide; studiul literaturii de specialitate și obținerea materialelor photocatalitice de calcogenuri și ortoferite în diferite condiții de sinteză..

Dezvoltarea acestor direcții conduce la rezolvarea și finalizarea următoarelor tematici:

- analiza grafenei cu defecte topologice, precum și a precursorilor ei organici, ca sursă de puncte cuantice (quantum-dots, QD) dinamice;
- clarificarea și re-formularea următoarelor concepte fundamentale din chimie-fizică: conceptul de "spațiu al proprietăților chimice" se aplică deopotrivă unor serii de molecule de polietilenamină linare și ramificate, în stare naturală și după docare (precursori de nanosisteme cu carbon) ca și la nano-interacții pe sisteme de carbon jucșapuse; aromaticitatea corelează cu gradul de izomerism pentru o serie de hidrocarburi policiclice aromatice; efectul de acumulare topologică a golorilor apare în rețelele de tip "fagure de miere" pe super-celule de grafen;
- prezenta abordare bondonică/bondotică a punctelor cuantice (bi-puncte cuantice/quantum double dots, QDD sau QD<sub>2</sub>=D) la nivelul sistemelor fotovoltaice sustenabile cu grafene se realizează prin modelarea și controlul bi-punctelor cuantice în celule Schottky cu bistrat de grafen;
- realizarea de pelicule subtiri epitaxiale de SnO<sub>2</sub> și WO<sub>3</sub> prin tehnica ablatiei laser;
- doparea peliculei subtiri cu ioni de heliu pentru ameliorarea caracteristicilor de material;
- caracterizarea fizico chimica și morfologica a structurilor obținute;
- actualizarea studiilor bibliografice prin realizarea unei baze de date referitoare la metodele de obținere a filmelor subtiri de TiO<sub>2</sub>, precum și metode de depunere in-situ a oxidului de wolfram direct din precursori pe suprafața filmelor subtiri de TiO<sub>2</sub> în vederea dezvoltării unor filme subtiri multi-strat de tipul TiO<sub>2</sub>/WO<sub>3</sub>;
- sintetizarea materialelor perovskitice de tipul ABO<sub>3</sub> prin diferite metode: metoda sol-gel, metoda coprecipitării, urmate de tratamente termice la diferite temperaturi și diferiti timpi de calcinare; caracterizarea materialelor obținute;
- studiul stabilității termice a antocianinelor: cianidin-3-glucozida (Cy-3-Glu) și malvidin-3-glucozida (Mv-3-Glu) și realizarea unor teste de degradare accelerată;
- obținerea și caracterizarea microparticulelor de carbonat de fier cu structura monocrystalină și cu dimensiuni controlate: actualizarea bazei de date, caracterizarea XRD, EDAX și SEM a particulelor de carbonat de fier obținute, stabilirea limitelor de temperatură și timp între care este favorizată cristalizarea carbonatului de fier prin cercetarea efectuată asupra descompunerii complexului FeNa4EDTA în prezența ureei;
- obținerea de magnetita mezocrystalină prin tratamentul termic controlat al monocrystalalelor de carbonat de fier și caracterizarea acesteia prin: difractie de raze X (caracterizarea structurii cristaline), microscopie electronica cu scanare, TEM (caracterizarea morfologica), analiza EDAX (analiza EDAX), VSM, SQUID, histeresograf (caracterizarea magnetica), studierea ordinii magnetice prin spectrometrie Mosbauer;
- obținerea prin iradierea în camp de microunde a 6 compuși: 1 amida, N-(2-bromo-fenil)-2-hidroxi-benzamida, menționată în literatura de specialitate, 2 esteri, unul etilic, [2-(2-bromo-fenilcarbamoi)-fenoxi]-acetatul de etil și unul metilic, [2-(2-bromo-fenilcarbamoi)-fenoxi]-acetat de metil, compuși noi, o hidrazida, N-(2-bromo-fenil)-2-hidrazinocarbonilmetoxi-benzamida, precum și 2 hidrazone 2-(5-bromo-2-hidroxi-benziliden-hidrazinocarbonilmetoxi)-N-(2-bromo-fenil)-benzamida și N-(2-bromo-fenil)-2-(4-dimetilamino-benziliden-hidrazinocarbonilmetoxi)-benzamida;
- caracterizarea completă a compușilor sintetizați prin analizarea prin metode moderne de analiză, IR, RMN, analiza elementala;
- clarificarea și re-formularea următoarelor concepte fundamentale din chimie-fizică:

- conceptul de "spațiu carbon-activ" pentru structurile bazate pe nanostructuri extinse de carbon, proiectate topologic și caracterizate prin energia de activare corelată cu indicii topologici energetic de tip Wiener;
  - conceptul de "cinetică moleculară foto-activată", cu analiza oferită de mașinile moleculare, pe baza componentelor structurale, rotaxani și catenane, și a combinațiilor complexe ale acestora în navete moleculare, sau cicluri moleculare cu rol în conversia energiei sau în transportul de sarcină, de informație chimică (activarea reactivității și cataliză cotrolată), etc.;
  - posibilitatea de a evidenția existența bondonului prin acțiune la distanță, viy; reactivitatea indușă la distanță, prin "unda bondonică" în spațiul carbonului activ; fie prin cuplare-decuplare electronică, la nivelul femtosecundelor, în regimul timpului de viață al bondonilor, sub foto-control; posibilitatea de a cupla cele două concepte de mai sus prin depozitarea-depunerea-sinteza directă a mașinilor moleculare pe nano-suprafețe extinse de carbon deschide posibilitatea unor "circuite integrate" nano-moleculare, cu mare potențial aplicativ;
- dezvoltarea de noi materiale necesare în diverse aplicații precum în protecția mediului, ca și în energetica solară;
- controlarea proprietăților filmelor epitaxiale obținute prin tehnica ablației laser, prin modificarea parametrilor de depunere, utilizând o metodă revoluționară ce conduce la obținerea de filme epitaxiale cu proprietăți performante;
- studiu asupra obținerii de filme subțiri epitaxiale cu proprietăți controlabile, asupra aplicabilității filmelor subțiri cu proprietăți superioare obținute prin diferite metode, precum și asupra determinării și investigării ai parametrilor necesari obținerii de filme subțiri cu proprietăți avansate;
- obținerea filmelor subțiri epitaxiale cu grosimea mai mică de 30 nm cu structură și cristalinitate orientată;
- doparea structurii astfel obținute cu ioni de heliu pentru a obține o structură cu proprietăți superioare a fost efectuată;
- caracterizarea fizico chimică a filmelor obținute prin metoda nouă de implantare de ioni de heliu;
- sinteze de laborator pentru obținere de filme subțiri de  $TiO_2$  pe substraturi diferite prin metode avansate;
- caracterizarea structurală și morfologică a filme subțiri de  $TiO_2$  obținute;
- realizarea metodologii optimizate pentru obținerea filmelor subțiri de  $TiO_2$  prin metodele propuse, filme subțiri de  $TiO_2$  nedopat;
- obținerea materialelor pervoskitice multifunctionale prin metode convenționale: tehnologia ceramica și metoda sol-gel urmata de tratament termic la diferite temperaturi și prin metode alternative: metoda ultrasonica cu sonotroda imersată în mediul de reacție și metoda hidrotermală asistată în camp de microonde (de la fotocataliza la conversie de energie);
- studiul proprietăților morfo-structurale ale materialelor obținute;
- studiul posibilității îmbunătățirii stabilității antocianinelor la tratament termic prin adiția unor cofactori atât în probe de antocianine pure cât și în extracte naturale de antocianine;
- testarea compușilor sintetici (quercitină, acid citric) și a extractelor de plante (rozmarin, cimbru) cu caracter oxidant puternic;
- evaluarea procesului de degradare prin aplicarea unui model de cinematică de ordinul 1 și calculul parametrilor cinematici;
- îmbunătățirea activității antioxidantă a antocinelor pure cât și a extractelor naturale de antocianine prin adiția cofactorilor;
- demonstrarea posibilității obținerii de cristale de maghemită poroasă, de dimensiuni submilimetrice, romboedrice cu suprafață specifică mare ( $40,14 \text{ m}^2 / \text{g}$ ) de obicei asociată cu cristalite de dimensiuni nanometrice;

- posibilitatea utilizării cristalelor de maghemită poroasă datorită dimensiunilor mari ( $150\text{ }\mu\text{m}$ ) și a cristalinitatii înalte într-o arie largă de aplicații, în special ca suporturi magnetice, senzori de gaz și electrozi pentru baterii de Li-ion; dimensiunile cristalelor sunt suficient de mari și rezistente la acțiunile mecanice, și permit atașarea unui contact electric;
- evaluarea celor 6 compusi sintetizati într-o fază anterioara (2016), facand parte din clasa salicilanilidei, esteri, hidrazide, hidrazone, prin trei metode chimice, DPPH, ABTS, FRAP, și una electrochimica, voltametria ciclica și determinarea activității antioxidantă a acestora;
- includerea compusilor [2-(2-bromo-fenilcarbamoi)-fenoxi]-acetatul de etil (ester etilic), N-(2-bromo-fenil)-2-hidrazinocarbonilmethoxy-benzamida (hidrazida), 2-(5-bromo-2-hidroxi-benziliden-hidrazinocarbonilmethoxy)-N-(2-bromo-fenil)-benzamida (hidrazone) în  $\beta$ -ciclodextrina, pentru a le îmbunătăți solubilitatea în apă (biодisponibilitatea) și eficiența moleculelor de medicament incluse, în organismele vii;
- caracterizarea complexelor obținute, în fază lichida și solidă, prin spectroscopie IR, RMN, spectrofotometrie UV-VIS, difracție RX, SEM;
- construirea și validarea a noi senzori care pot fi utilizati la scanarea urinei și sangelui pentru detectia precoce a leucemiei;
- obținerea de materiale luminescente, doparea lor cu ioni ai lantanidelor;
- caracterizarea fizico-chimică a acestor materiale;
- înglobarea pulberilor în polimeri transparenti;
- identificarea unui material eficient, candidat pentru fabricarea a unui concentrator solar luminescent eficient realizat prin înglobarea nano pulberilor în PMMA și obținerea emisiei luminoase la iluminare cu lumina UV și albastră;
- extractia compușilor organici bioactivi cu sulf din plante ce aparțin florei autohtone;
- studiu complex de literatură care a arătat posibilitățile de extractie, de analiză și de utilizare a compușilor organici bioactivi cu sulf;
- studiu asupra noțiunilor generale despre porfirine și derivații porfirinici;
- importanța studiului fenomenelor de agregare ale porfirinelor;
- prezentarea unor studii în care agregatele porfirinice au fost caracterizate folosind diferite metode de investigare;
- studiu de literatură referitor la utilitatea materialelor photocatalitice selectate pentru cercetare cât și a potențialului lor photocatalitic;
- stabilirea celei mai adecvate metode de obținere a materialelor photocatalitice preconizate și analiza lor prin diferite metode fizico-chimice;
- demonstrarea prin GC a influenței suprafetei specifice asupra photocatalizatorilor;
- noi proiecte de cercetare dezvoltare în cadrul planului național sau programe ale UE, pe baza rezultatelor științifice obținute;
- participare la rețele de cercetare interne și internaționale;
- publicarea unor lucrări în reviste de specialitate din țară și din străinătate.

În cadrul acestui obiectiv au fost abordate următoarele proiecte:

- **PN 16 14 03 01. Senzitivatoare fotovoltaice cu straturi de grafen. De la nanostructura de material la funcția supra-electroconductoare.** Acesta a avut în componența lui etapele:
- Caracterizarea, calculul și măsurarea bi-grafenelor cu defecte topologice pentru nanomateriale în senzitivarea foto-electrochimică
  - Modelarea, designul, și controlul bi-punctelor cuantice (quantum double-dots/bondots) transportate în sisteme fotovoltaice cu bi-grafene

În cadrul acestei prime etape în vederea implementării proiectului conform direcțiilor/țintelor propuse, s-a dezvoltat domeniul de cercetare fundamentală, în cadrul căruia s-a analizat grafena cu defecte topologice, precum și precursorii ei organici, ca sursă de puncte cuantice (quantum-dots, QD) dinamice.

În acest stadiu, următoarele concepte fundamentale din chimie-fizică au fost clarificate și re-formulate:

- conceptul de "spațiu al proprietăților chimice" se aplică deopotrivă unor serii de molecule de polietilenamină lineare și ramificate, în stare naturală și după docare (precursori de nanosisteme cu carbon) ca și la nano-interacții pe sisteme de carbon jucșapuse;
- aromaticitatea corelează cu gradul de izomerism pentru o serie de hidrocarburi policiclice aromatice;
- efectul de acumulare topologică a golorilor apare în rețelele de tip "fagure de miere" pe super-celule de grafen.

Prezenta abordare bondonică/bondotică a punctelor cuantice (bi-puncte cuantice/quantum double dots, QDD sau QD<sub>2</sub>=D) la nivelul sistemelor fotovoltaice sustenabile cu grafene se realizează prin modelarea și controlul bi-punctelor cuantice în celule Schottky cu bistrat de grafene.

În cea de-a doua etapă, au fost clarificate și re-formulate următoarele concepte fundamentale din chimie-fizică:

- Conceptul de "spațiu carbon-activ" pentru structurile bazate pe nanostructuri extinse de carbon, proiectate topologic și caracterizate prin energia de activare corelată cu indicii topologice energetic de tip Wiener; în acest caz, distanțele inter-atomice și adiacența (dublă sau simplă legătură de carbon) sunt esențiale pentru proprietățile locale și globale, dar și Glocale ale sistemului (de exemplu legate de funcționalizarea polimerică, cuplarea grafen-fullerene, etc.);
- Conceptul de "cinetică moleculară foto-activată", cu analiza oferită de mașinile moleculare, pe baza componentelor structurale, rotaxani și catenane, și a combinațiilor complexe ale acestora în navete moleculare, sau cicluri moleculare cu rol în conversia energiei sau în transportul de sarcină, de informație chimică (activarea reactivității și cataliză controlată), etc.
- Posibilitatea de a evidenția existența bondonului prin acțiune la distanță, viy. Reactivitatea indusă la distanță, prin "unda bondonică" în spațiul carbonului activ; fie prin cuplare-decuplare electronică, la nivelul femtosecundelor, în regimul timpului de viață al bondonilor, sub foto-control; posibilitatea de a cupla cele două concepe de mai sus prin depozitarea-depunerea-sinteza direct a mașinilor moleculare pe nano-suprafețe extinse de carbon deschide posibilitatea unor "circuite integrate" nano-moleculare, cu mare potențial aplicativ.

➤ **PN 16 14 03 02. Obtinerea de filme epitaxiale cu proprietati controlabile prin tehnica ablatiei laser.** Aceasta a avut în componența lui etapele:

- Obtinerea și caracterizarea de filme subtiri de SnO<sub>2</sub> obținute prin ablatie laser utilizându-se tehnica implantării de ioni de heliu de energie joasă
- Obtinerea și caracterizarea de filme subtiri de oxid de wolfram utilizându-se tehnica implantării de ioni de heliu de energie joasă
- Studiu aprofundat bazat pe posibile aplicatii ale filmelor astfel obținute

În cadrul prezentului proiect s-a urmărit realizarea de pelicule subtiri epitaxiale de SnO<sub>2</sub> și Wo<sub>3</sub> prin tehnica ablatiei laser; doparea peliculei subtiri cu ioni de heliu pentru ameliorarea caracteristicilor de material;

În etapele derulate s-au realizat următoarele:

- obtinerea de filme subțiri epitaxiale cu structura și cristalinitate ridicata;
- doparea structurii cu ioni de heliu pentru crearea de materiale și structuri avansate, performante și cu proprietati predictibile.
- caracterizarea fizico chimica și morfologica a structurilor obținute.
- efectul implantului cu ioni de heliu asupra proprietatilor fizico-chimice a structurilor; posibile aplicatii.

- au fost obtinute filme epitaxiale de SnO<sub>2</sub> prin ablatie laser de la o tinta stoichiometrica pe diferite suporturi monocristaline.
- a fost studiata deformarea structurii observarea topografiei si urmarite schimbarile parametrilor optici ai filmelor obtinute.
- s-a demonstrat ca implantarea de heliu in filme WO<sub>3</sub> crescute epitaxial si coherent tensionate induce o expansiune de aproape 2% a parametrului de retea perpendicular pe planul cristalin al structurii. Ellipsometria arata că această expansiune a parametrului de retea deplaseaza spectrul de absorbție spre energii mai mici și reduce în mod eficient banda optică interzisa. Masuratorile arata ca banda interzisa optica este mai mica cu aproximativ 0,15 eV/ deformatie la suta, o valoare care este în mod surprinzător mare, dar este in bun acord cu calculele noastre de densitate funcționala.
- s-a studiat influența implantarii cu ioni pe heliu cu energie scăzută asupra spectrului de absorbție optică a filmelor epitaxiale de WO<sub>3</sub>. S-a demonstrat ca doze mici de heliu implantat in reteaua de WO<sub>3</sub> induc în mod eficient deformarea uniaxială a structurii retelei, care duce la o deplasare considerabilă a spectrului de absorbție și reducerea de benzii optice interzise.

Scopul studiilor este dezvoltarea de noi materiale necesare in diverse aplicatii precum in protecția mediului, cat si in energetica solară. In acest proiect se vor urmări controlarea proprietăților filmelor epitaxiale obtinute prin tehnica ablației laser, prin modificarea parametrilor de depunere, utilizând o metoda revoluționară ce conduce la obtinerea de filme epitaxiale cu proprietăți performante. Materialele utilizate in acest studiu au fost semiconductori deoarece sunt cel mai des folosiți in aplicatii ale energiei solare precum si in protecția mediului. S-a efectuat studiul asupra obținerii de filme subțiri epitaxiale cu proprietăți controlabile, asupra aplicabilității filmelor subțiri cu proprietăți superioare obtinute prin diferite metode, precum si supra determinarii si investigarii ai parametrilor necesari obținerii de filme subțiri cu proprietăți avansate; S-au obținut filme subțiri epitaxiale cu grosimea mai mica de 30 nm cu structura si cristalinitate orientata. Doparea structurii astfel obtinute cu ioni de heliu pentru a obține o structura cu proprietăți superioare a fost efectuata cu succes precum si caracterizarea fizico chimica a filmelor obtinute prin metoda noua de implantare de ioni de heliu.

➤ **PN 16 14 03 04. Dezvoltarea de metode avansate privind obtinerea de filme subtiri de TiO<sub>2</sub>/WO<sub>3</sub>.** Acesta a avut în componența lui etapele:

- Studii bibliografice privind obtinerea filmelor subtiri multi-strat de TiO<sub>2</sub>/WO<sub>3</sub> prin metode alternative; proiectarea metodelor de obtinere a filmelor subtiri de TiO<sub>2</sub>/WO<sub>3</sub> prin metodele propuse in cadrul proiectului
- Obtinerea filmelor subtiri de TiO<sub>2</sub> pe substraturi diferite prin metode avansate si caracterizarea structurala si morfologica a acestora

În aceasta etapă s-a realizat actualizarea studiilor bibliografice prin realizarea unei baze de date care contine informatii referitoare la metodele de obtinere a filmelor subtiri de TiO<sub>2</sub>, precum si metode de depunere in-situ a oxidului de wolfram direct din precursori pe suprafata filmelor subtiri de TiO<sub>2</sub> in vederea dezvoltarii unor filme subtiri multi-strat de tipul TiO<sub>2</sub>/WO<sub>3</sub>

In cadrul etapei din anul 2017 au fost realizate sinteze de laborator pentru obtinere de filme subtiri de TiO<sub>2</sub> pe substraturi diferite prin metode avansate si caracterizarea structurala si morfologica a acestora. In cadrul proiectului s-au realizat metodologii optimizate pentru obtinerea filmelor subtiri de TiO<sub>2</sub> prin metodele propuse, filme subtiri de TiO<sub>2</sub> nedopat, buletine de analiza de conformitate, participari conferinte nationale/internationale, elaborare propunerii proiecte de cercetare, raport de cercetare.

-

- **PN 16 14 03 05. Dezvoltarea de materiale multifunctionale de tipul ABO<sub>3</sub> si studiul proprietatilor fizico-chimice caracteristice.** Aceasta a avut în componență lui etapa:
    - Sinteză materialelor de tipul ABO<sub>3</sub> cu structura perovskitica nedopate și dopate cu ioni metalici (Al, Cu, Ti, etc) prin tehnologia ceramica și metoda sol-gel urmata de tratamente tremice la diferite temperaturi; studiul proprietatilor fizico-chimice
    - Sinteză materialelor de tipul ABO<sub>3</sub> cu structura perovskitica nedopate și dopate cu ioni metalici (Al, Cu, Ti, etc) prin metoda hidrotermala asistata ultrasonic și hidrotermal in camp de microunde; studiul proprietatilor fizico-chimice. Optimizarea metodelor de sinteza in vederea obtinerii de materiale cu structura perovskitica multifunctionale
  - **Scopul** prezentului proiect este de a dezvolta structuri perovskitice bazate pe NaTaO<sub>3</sub>, dopate cu diferiti ioni metalici (Ti, Al, Cu), care să prezinte proprietati avansate, cu aplicabilitate in diferite domenii (fotocataliza, recuperare de energie, etc).
  - **Obiectivele specifice** ale proiectului sunt urmatoarele: (i) Dezvoltarea și aplicarea de noi protocoale pentru obtinerea de structuri perovskitice pe baza de NaTaO<sub>3</sub> nedopat și dopat cu Ti, Al sau Cu; (ii) Dezvoltarea de metodologii alternative și protocolul aferent pentru analiza produsilor sintetizati; (iii) Sintetizarea structurilor perovskitice de NaTaO<sub>3</sub> nedopat și dopat prin metode inovatoare; (iv) Caracterizarea fizico-chimica a materialelor obtinute.
- În prima etapă materialele perovskitice de tipul ABO<sub>3</sub> au fost sintetizate prin diferite metode: metoda sol-gel, metoda coprecipitarii, urmate de tratamente termice la diferite temperaturi și diferiti timpi de calcinare.
- Materialele utilizate pentru sinteza NaTaO<sub>3</sub> dopat cu Cu au fost: etoxidul de tantal (Ta(OC<sub>2</sub>H<sub>5</sub>)<sub>5</sub>), hidroxid de sodiu (NaOH) și nitrat de cupru (Cu (NO<sub>3</sub>)<sub>2</sub>). Procedura de sinteza:
- 1 mL etoxid de tantal a fost adaugat la 50 mL apa bidistilata sub continua agitare pe un agitator magnetic, peste care s-a adaugat 0.017 g nitrat de cupru. Precipitarea s-a realizat prin adaugarea solutiei 2M NaOH, pana la pH 13. Suspensia obtinuta a fost supusa procesului de ultrasonare cu un aparat Sonics Vibra Cell cu sonotroda imersata in mediul de reactie. Precipitatul obtinut a fost filtrat și spalat cu apa bidistilata pana la pH neutru. Produsul obtinut a fost tratat termic la temperatura de 600°C, timp de 6 ore.
  - Structura cristalina și faza perovskitica a compusului a fost determinata prin Difractometrul PANalytical X'Pert PRO MPD cu tub de Cu, la temperatura camerei, cu o viteza de scanare de 2°/min.
  - Spectrele de reflectanta difusa au fost masurate prin spectrometrie UV-Vis, folosind un aparat Lambda 950 Perkin Elmer, intre 200 și 500 nm.
  - Analiza calitativa și mapa elementelor a fost realizata folosind un Microscop electronic de baleaj de tipul Inspect S cu Edax.
  - Parametri electrici au fost masurati in doemniul de frecventa (50 Hz - 2 MHz) și la temperatura (30-120 °C) folosind un aparat Agilent E4980A.

Acste materiale vor fi obtinute prin metode alternative pentru a identifica metoda optima și cu randament cat mai mare (temperatura și timpul de sinteza cat mai scazute). Pentru sinteza materialelor se vor utiliza urmatoarele metode de sinteza: tehnologia ceramica și metoda sol-gel urmata de tratament tremic la diferite tempearaturi și diferiti timpi, dar și metoda ultrasonică cu sonotroda imersata in mediul de reactie și metoda hidrotermala asistata in camp de microunde. Astfel, proiectul contribuie la dezvoltarea cunostintelor in domeniu bazandu-se pe elementele de nouitate pe care le aduce in ceea ce priveste metoda de obtinere, natura și proprietatile materialelor studiate, domeniul de aplicabilitate care contine multe elemente de nouitate.

Nouitatea solutiilor propuse in acest proiect sunt urmatoarele:

- Obtinerea prin prin metode conventionale: tehnologia ceramica și metoda sol-gel urmata de tratament tremic la diferite tempearaturi și prin metode alternative: metoda ultrasonică cu sonotroda imersata in mediul de reactie și metoda hidrotermala asistata in camp de

microunde a materialelor pervoskitice multifunctionale (de la fotocataliza la conversie de energie);

- Studiul proprietatilor mofo-structurale ale materialelor obtinute.

➤ **PN 16 14 03 06. Soluții inovative de stabilizare a extractelor naturale pe bază de antocianine.** Acesta a avut în componența lui etapele:

- Studiul stabilității termice a antocianinelor pure pe parcursul încălzirii și depozitării
- Evaluarea efectului temperaturii asupra antocianinelor din materiale vegetale (legume și/sau fructe) pe parcursul încălzirii și depozitării
- Studiul influenței unor cofactori în vederea găsirii de soluții pentru creșterea stabilității antocianinelor

Degradarea antocianinelor se poate produce în timpul extractiei, purificării, procesării și depozitării acestora, ceea ce poate avea un impact profund asupra calității culorii și poate afecta, de asemenea, proprietățile nutritive. Procesarea termică a alimentelor implică încălzirea la temperaturi cuprinse între 50 și 150°C în funcție de pH-ul produsului și perioada de valabilitate dorită. Viteza de degradare a antocianinelor crește în timpul procesării și depozitării la temperaturi ridicate. Studiul influenței temperaturii asupra compușilor puri este importantă pentru că astfel se evită orice posibilă influență a altor compuși (zaharuri, acizi organici, vitamine, compuși fenolici, etc.) care pot exista în materialul vegetal (fructe, legume). S-au folosit standarde de antocianine disponibile comercial (10 mg, Extrasynthese Franta) și anume cianidin-3-glucozida (Cy-3-Glu) și malvidin-3-glucozida (Mv-3-Glu).

Înainte de începerea testelor experimentale de degradare termică, a fost necesară trasarea curbelor de etalonare în vederea evaluării cantitative a probelor supuse degradării. Aceste vor fi necesare și în etapele viitoare ale proiectului pentru cuantificare în probele vegetale. Pentru o quantificare cât mai acurate, etalonarea s-a realizat atât prin spectrofotometrie UV-Vis cât și prin cromatografie de lichide de înaltă performanță (HPLC). Pentru toate curbele de etalonare s-au obținut coeficienți de determinare ( $R^2$ ) cu valori peste 0.99, fapt ce indică o foarte bună corelație a datelor experimentale.

Stabilitatea termică a celor două antocianine a fost studiată la temperatura camerei pe parcursul a 30 de zile, precum și la 90°C timp de 5 ore. Analizele probelor stocate la temperatura camerei au demonstrat că cianidin-3-glucozida a prezentat o scădere de 9% a concentrației iar malvidin-3-glucozida o scădere de 15% a concentrației pe durata depozitării.

Pentru teste de degradare accelerată, din soluțiile stoc preparate din cele două antocianine, s-au introdus câte 50 µL în tuburi de sticlă bine închise pentru a se evita evaporarea acestora și au fost plasate într-o etuvă preîncălzită la temperatura de 90°C. Probele au fost analizate prin spectrofotometrie UV-Vis, HPLC și MS la intervale de timp regulate (30, 90, 150, 210, 300 minute). Pe durata tratamentului termic, a fost monitorizată și activitatea antioxidantă (AA) a probelor supuse degradării. Pentru probele degradate la 90°C, s-a constatat o ușoară tendință de descreștere a activității antioxidantă în cazul probelor de Mv-3-Glu.

În cazul Mv-3-Glu se constată o scădere a absorbanței la  $\lambda_{max}$  (UV-Vis) cu creșterea timpului de încălzire ceea ce denotă degradarea termică a acesteia și implicit scăderea concentrației. Acest lucru a fost confirmat și de analizele HPLC unde se observă scăderea în timp a înălțimii și ariei picului corespunzător malvidin-3-glucozidei. Această tendință nu este valabilă și în cazul cianidin-3-glucozidei unde după 2.5 ore de tratament termic se constată o tendință de creștere a absorbanței. Acest fenomen poate indica formarea unor produși de degradare colorați (cianidină) care prezintă un maxim al absorbanței în jurul aceleiași lungimi de undă. În spectrele MS s-a observat picul major la m/z 289 corespunzător cianidinei, aceasta rezultând prin deglicolizarea Cy-3-Glu în timpul tratamentului termic. Analizele efectuate au demonstrat că, la 90°C, malvidin-3-glucozida suferă o degradare accelerată formându-se produși de degradare care absorb la 250-330 nm. În cazul cianidin-3-glucozidei, se produce deglicolizarea rezultând cianidină, precum și alți produși

secundari. Datele obținute vor fi utilizate în fazele următoare ale proiectului pentru studiul stabilității unor extracte naturale de antocianine.

Principala dificultate în folosirea antocianinelor atât ca și coloranți alimentari cât și pentru calitățile lor nutritive, este stabilitatea lor scăzută. Viteza de degradare a acestora crește în timpul procesării și depozitării la temperaturi ridicate. În acest context, în prima etapă a proiectului s-a studiat stabilitatea termică a două antocianine pure disponibile comercial, cianidin-3-glucozidă și malvidin-3-glucozidă. Studiul influenței temperaturii asupra compușilor puri a fost importantă pentru că astfel se evită orice posibilă influență a altor compuși (zaharuri, acizi organici, vitamine, compuși fenolici, etc.) care pot exista în materialul vegetal (fructe, legume). Pe parcursul degradării la temperatura camerei și la 90°C, probele au fost analizate prin metode moderne UV-Vis, HPLC și MS. La temperatura camerei, degradarea acestora se produce lent. La 90°C, malvidin-3-glucozida suferă o degradare accelerată formându-se produși de degradare care absorb la 250-330 nm. În cazul cianidin-3-glucozidei, se produce deglicolizarea rezultând cianidină, precum și alți produși secundari. În același mod, în etapa a II-a, s-a continuat cu studiul stabilității termice a extractelor vegetale concentrate în antocianine. La temperatura camerei, degradarea antocianinelor se produce lent, după 30 de zile ajungându-se la injumătățirea concentrației de antocianine. La temperatură ridicată (90°C), după 5 ore de tratament termic s-a constatat o scădere de doar 20% a conținutului de antocianine din extractul vegetal, acest fapt indicând un potențial ridicat pentru utilizarea extractului ca și colorant natural în industria alimentară. Conținutul de compuși fenolici și activitatea antioxidantă au prezentat o tendință de creștere după 2 ore de tratament termic datorită formării unor produși secundari de natură fenolică cu potențial antioxidant.

S-a studiat posibilitatea îmbunătățirii stabilității antocianinelor la tratament termic prin adiția unor cofactori atât în probe de antocianine pure cât și în extracte naturale de antocianine. Au fost testați compuși sintetici (quercitină, acid citric) și extracte de plante (rozmarin, cimbru) cu caracter oxidant puternic. Pentru evaluarea procesului de degradare s-a aplicat un model de cinetică de ordinul 1 și s-au calculat parametri cinetici. Valorile obținute pentru coeficienți de determinare indică o bună corelare a datelor experimentale cu modelul matematic de ordinul 1. Atât în cazul antocinelor pure cât și în cazul extractelor naturale de antocianine, adiția cofactorilor a îmbunătățit activitatea antioxidantă a acestora dar nu a determinat o creștere a stabilității acestora. Din acest motiv, este necesară testarea și a altor antioxidanți ca și cofactori și a altor metode de stabilizare.

Rezultatele obținute au fost comunicate la 2 conferințe internaționale: *XIX YUCORR International Conference*, Serbia și *International U.A.B. – B.EN.A Conference „Environmental Engineering and Sustainable Developement”*, România. De asemenea, au fost redactate 2 articole științifice din care unul este publicat iar celălalt este trimis spre publicare la revista *ISI Journal of Environmental Protection and Ecology*:

- Căta A., Ștefănuț M.N., Ienașcu I.M.C., Thermal Stability of Anthocyanin-based Extract from Red Onion Skin, Proceedings of *XIX YUCORR International Conference*, 2017, p. 198-203.
- Căta A., Ștefănuț M.N., Fițigău F., Vaszilcsin C., Ienașcu I.M.C., Stability evaluation of some commercial anthocyanins, trimis spre publicare la *Journal of Environmental Protection and Ecology*.

- **PN 16 14 03 07. Obținerea de oxizi de fier cu structura mezocrystalina ca purtatori dirijați de medicamente pentru aplicatii biomedicale.** Aceasta a avut în componența lui etapele:
- Dezvoltarea unor instalații noi de sinteza. Studiu bibliografic. Obținerea și caracterizarea microparticulelor de carbonat de fier cu structura monocristalina și cu dimensiuni controlate
  - Obținerea de magnetita mezocrystalina prin tratamentul termic controlat al monocristalelor de carbonat de fier. Caracterizarea proprietăților fizice (magnetizare, structura cristalina, porozitate). Redactarea fazei. Concluzii.

- Obtinerea de maghemita (prin tratamentul termic al magnetitei) prin tratamentul termic al magnetitei obtinute in faza 3. Caracterizarea proprietatilor fizice (magnetizatie, structura cristalina, porozitate). Redactarea fazei. Concluzii.

Obiectivul principal al proiectului îl constituie obținerea și caracterizarea de oxizi de fier cu dimensiuni micrometrice și cu proprietăți fizice avansate, în particular obținerea de magnetita și maghemita cu structura internă mezocristalina pentru a fi utilizate ca purtatori dirijati de medicamente în aplicatii biomedical. Controlul precis al dimensiunilor, al morfologiei și mai ales al proprietatilor magnetice vor fi de asemenea investigate.

Etapa I a prezentului proiect a avut în componenta ei următoarele activități:

- A 1. Studiu bibliografic.
- A 2. Obtinerea și caracterizarea microparticulelor de carbonat de fier cu structura monocristalina și cu dimensiuni controlate.
- A 3. Diseminarea rezultatelor cercetarii obținute în faza I.

În cadrul cărora s-au realizat următoarele:

- R1. S-a facut actualizarea bazei de date.
- R2. S-a facut caracterizarea XRD, EDAX și SEM a particulelor de carbonat de fier obținute.
- R3. Cercetarea efectuată asupra descompunerii complexului FeNa4EDTA în prezența ureei, a avut ca scop principal sătulirea limitelor de temperatură și timp între care este favorizată cristalizarea carbonatului de fier. Studiul s-a făcut utilizând aceiasi precursori și aceleași concentrații molare. S-au variat temperaturile și timpii de autoclavare.

S-au putut trage următoarele concluzii:

1. În intervalul de temperaturi cuprins între 120°C și 200°C, la timpi de autoclavare cuprinși între 4h și 24h s-a obținut hematită în fază unica, în stare pură;
2. Pentru o temperatură de 230°C și un timp de autoclavare de 24h, s-a proiectat și realizat un nou procedeu de sinteză a nanoparticulelor de oxid feric (hematită), bazat pe descompunerea hidrotermală a complexului Fe-EDTA, în prezența ureei și a apei oxigenate.
3. La temperatura de 230°C, fară apă oxigenată, utilizând o cantitate de uree de patru ori mai mare (de la 1.8g la 7,2g), la timpi de autoclavare cuprinși între 4h și 10h, s-a obținut hematită în fază unica, în stare pură. La timpi de autoclavare cuprinși între 10h și 24h, s-a obținut fază dublă hematită / carbonat de fier. La timpi de autoclavare cuprinși între 26h și 30h, hematita a disparut din sistem și a apărut magnetita, obținându-se astfel fază dublă carbonat de fier / magnetită, iar la timpi de autoclavare mai mari de 35 de ore dispără din sistem carbonatul de fier și ramâne ca fază unică magnetita;
4. Pentru o temperatură de 230°C și 38 h de autoclavare, s-a proiectat și realizat un nou procedeu de sinteză a microparticulelor de oxid feroferic (magnetită), bazat pe descompunerea hidrotermală a complexului Fe-EDTA, în prezența ureei.
5. Pentru o temperatură de 230°C și 16 h de autoclavare, s-a proiectat și realizat un nou procedeu de sinteză a microparticulelor de carbonat de fier (siderită), bazat pe descompunerea hidrotermală a complexului Fe-EDTA, în prezența ureei.
6. La temperatura de 250°C, în prima ora de autoclavare, hematita este prezentă în sistem. În primele două până la patru ore de autoclavare, am obținut amestec de magnetită și hematită. În intervalul 4 - 16 ore s-a obținut amestec de magnetită / carbonat de fier. La peste 16 ore de autoclavare dispără magnetita și ramâne numai carbonatul de fier în fază unică monocristalină pură;
7. La 250°C și peste 36 h de autoclavare, în sistem reapare magnetita în fază unică. Ca elemente speciale în cadrul acestei sinteze, se remarcă structura potențial monocristalină în configurație dublu

piramidală la dimensiuni micrometrice a magnetitei. Neobișnuit și notabil este faptul că histereza are suprafața foarte mică indicând o comportare superparamagnetică (la dimensiuni micrometrice!);

8. Se remarcă faptul că, spre deosebire de sinteza de la 230°C unde magnetita a luat nastere în urma descompunerii sideritei, în acest caz siderita ia nastere în urma descompunerii magnetitei (care este prezență în sistem la 2h de autoclavare);

Etapa II a prezentului proiect a avut în componenta ei următoarele activități:

- A 3.1. Obținerea de magnetita mezocristalina prin tratamentul termic controlat al monocristalelor de carbonat de fier;
- A 3.2. Caracterizarea structurii cristaline prin XRD (difracție de raze X);
- A 3.3. Caracterizarea morfologică prin SEM (microscopie electronică cu scanare, TEM);
- A 3.4. Verificarea puritatei cristalelor prin analiza EDAX;
- A 3.5. Caracterizarea magnetică (VSM, SQUID, histeresigraf);
- A 3.6. Studierea ordinii magnetice prin specrometrie Mosbauer;
- A 3.7. Redactarea fazei, concluziei.

Pornind de la monocristalele de FeCO<sub>3</sub> cu dimensiuni până la 150 µm, prin transformare topotactică, s-au obținut structuri poroase de Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> cu cristalinitate înaltă, cu aceeași dimensiuni exterioare și cu aceeași morfologie romboedrală ca ale precursorului. Cu toate că prezintă fațete netede, cristalele au porozitate internă și suprafață specifică foarte mare de 88,55 m<sup>2</sup> / g. S-a constatat că cristalele de Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> sunt formate dintr-un aranjament ordonat de cristalite nanometrice ceea ce indică faptul că structura internă este mezocristalină. Cristalinitatea înaltă este confirmată de maximele ascuțite ale spectrului XRD. Analiza X-ray Line-Profile Fitting confirmă dimensiunile medii ale cristalitelor de 64 ± 6 nm ceea ce este în concordanță cu observațiile SEM. Banda îngustă a Fe-O de la 570 cm<sup>-1</sup> din spectrul FT-IR al cristalelor de magnetită indică puritatea ridicată și lipsa defectelor. Oxidul de fier obținut este pur. Analiza spectrului IR permite distingerea clară a fazei pure de magnetită. Cristalitele de oxid de Fe prezintă histereză magnetică, cu magnetizare de saturatie de 92,1 emu / g, apropiată de valoarea maximă raportată în literatura de specialitate.

Rezultatele de față au demonstrat posibilitatea obținerii de cristale de magnetită de dimensiuni submilimetrice și morfologie romboedrală cu suprafață specifică mare 88,55 m<sup>2</sup> / g, de obicei asociată cu cristalitele de dimensiuni nanometrice. Dimensiunile lor mari (150 µm) și cristalinitatea înaltă pot face ca aceste cristale să fie utile într-o arie largă de aplicații, în special ca suporturi magnetice. Dimensiunile cristalelor sunt suficient de mari și rezistente la acțiunile mecanice, și permit atașarea unui contact electric, lasând o suprafață suficient de mare pentru suprafața specifică de reactivitate. După cunoștințele noastre rezultatele obținute sunt unice și sunt prezentate aici în premieră.

Obiectivul fazei 3 aferent anului 2017 au fost atins după cum urmează:

Prin tratamentul termic al mezocristalelor poroase de Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> s-a obținut pentru prima oară mezocristale de γ-Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> tetragonală cu vacanțe ordonate, cu cristalinitate înaltă, cu aceeași morfologie romboedrală și aceeași dimensiuni exterioare ca și ale precursorului. Cu toate că fațetele cristalelor de maghemită sunt netede, porozitatea internă este mare; suprafața specifică este 40,14 m<sup>2</sup> / g, evaluată prin metoda BET. Argumentele teoretice dar și aranjamentul intern al cristalitelor (imagistica SEM) ne indică faptul că structura internă este mezocristalină. Cristalinitatea înaltă este confirmată de maximele ascuțite ale spectrului XRD. Analiza X-ray Line-Profile Fitting confirmă nanostructura cristalitelor și dimensiunile medii de 84 ± 8 nm pentru maghemită în concordanță cu observațiile SEM. Banda corespunzătoare Fe-O în spectrul maghemitei este dominată de trei benzi de absorbție de la 556 cm<sup>-1</sup>, 638 cm<sup>-1</sup> și 696 cm<sup>-1</sup> (interzis pentru structura de spinel) atribuită structurii tetragonale cu vacanțe ordonate. Oxidul de fier obținut este pur. Cristalele de oxid de Fe prezintă histereză magnetică, cu magnetizare de saturatie de 85,5 emu / g, aproape de valorile maxime raportate în literatura de specialitate. Rezultatele de față au demonstrat posibilitatea obținerii de cristale de maghemită poroasă, de dimensiuni submilimetrice, romboedrice cu suprafață specifică

mare (40,14 m<sup>2</sup> / g) de obicei asociată cu cristalite de dimensiuni nanometrice. Dimensiunile lor mari (150 µm) și cristalinitatea înaltă pot face ca aceste cristale să fie utile într-o arie largă de aplicații, în special ca suporturi magnetice, senzori de gaz și electrozi pentru baterii de Li-ion. Dimensiunile cristalelor sunt suficient de mari și rezistente la acțiunile mecanice, și permit atașarea unui contact electric. După cunoștințele noastre, rezultatele obținute de către noi sunt unice și sunt prezentate aici pentru prima dată.

➤ **PN 16 14 03 08. Formulări topice pe bază de noi complecși de inclusiune supramoleculară hidroxibenzamide-ciclodextrină.** Acesta a avut în componența lui etapele:

- Sintiza în câmp cu microunde a hidroxibenzamidelor, esterilor, hidrazidelor, hidrazoneelor și caracterizarea acestora
- Evaluarea capacității antioxidantă a compușilor sintetizați utilizând metode chimice și electrochimice
- Sintiza și caracterizarea complecșilor derivat hidroxibenzamic-ciclodextrină

Utilizand iradierea în camp de microunde, au fost obținuti 6 compusi, 1 amida, N-(2-bromo-fenil)-2-hidroxi-benzamida, menționata in literatura de specialitate, 2 esteri, unul etilic, [2-(2-bromo-fenilcarbamoil)-fenoxi]-acetatul de etil si unul metilic, [2-(2-bromo-fenilcarbamoil)-fenoxi]-acetat de metil, compusi noi, o hidrazida, N-(2-bromo-fenil)-2-hidrazinocarbonilmethoxy-benzamida, precum și 2 hidrazone 2-(5-bromo-2-hidroxi-benziliden-hidrazinocarbonilmethoxy)-N-(2-bromo-fenil)-benzamida si N-(2-bromo-fenil)-2-(4-dimetilamino-benziliden-hidrazinocarbonilmethoxy)-benzamida de asemenea compusi noi, nemenționati in literatura de specialitate.

Compușii sintetizați au fost analizați prin metode moderne de analiză, IR, RMN, analiza elementală, obținându-se o caracterizare completă a acestora. Datele spectrale obținute demonstrează în totalitate strucura propusă pentru compușii nou sintetizați.

Obiectivele propuse în cadrul celor 2 etape aferente anului 2017 au fost realizat în totalitate. Cei 6 compusi sintetizati intr-o faza anterioara (2016), facand parte din clasa salicilaniidei, esteri, hidrazide, hidrazone, au fost evaluati prin trei metode chimice, DPPH, ABTS, FRAP, si una electrochimica, voltametria ciclica si a fost determinata activitatea antioxidantă a acestora. În continuare, compusii [2-(2-bromo-fenilcarbamoil)-fenoxi]-acetatul de etil (ester etilic), N-(2-bromo-fenil)-2-hidrazinocarbonilmethoxy-benzamida (hidrazida), 2-(5-bromo-2-hidroxi-benziliden-hidrazinocarbonilmethoxy)-N-(2-bromo-fenil)-benzamida (hidrazone) au fost inclusi în β-ciclodextrina, pentru a le îmbunătăți solubilitatea în apă (biodisponibilitatea) și eficiența moleculelor de medicament incluse, în organismele vii. Complecsii obținuti, în fază lichida și solidă, au fost caracterizați prin spectroscopie IR, RMN, spectrofotometrie UV-VIS, difracție RX, SEM. Datele obținute confirmă formarea complecșilor.

➤ **PN 16 14 03 09. Dezvoltarea unor noi senzori bazati pe materiale inovative pentru determinarea precoce a leucemiei.** Acesta a avut în componența lui etapa:

- Dezvoltarea de senzori pentru determinarea 8-hidroxi-2'-deoxiguanozina și 8-nitroguanina

S-au construit și validat noi senzori care pot fi utilizati la scanarea urinei și sangelui pentru detectia precoce a leucemiei.

➤ **PN 16 14 03 10. Obținerea de materiale luminofore și estimarea aplicabilității lor pentru conversia radiației solare în energie electrică.** Acesta a avut în componența lui etapa:

- Obținerea de materiale luminescente și doparea lor cu ioni ai lantanidelor

În cadrul prezentei etape s-au realizat următoarele: obținerea de materiale luminescente, doparea lor cu ioni ai lantanidelor, caracterizarea fizico-chimică și încercări de înglobarea a pulberilor în polimeri transparenti. S-au obținut o serie de compuși optici, dintre care au fost identificați cei mai eficienți și ulterior înglobați în polimerul PMMA. Un important indicator de evaluare este considerat înglobarea nano pulberilor în PMMA și

obtinerea emisiei luminoase la iluminare cu lumina UV și albastră, fapt ce vorbește despre identificarea unui material eficient, candidat pentru fabricarea a unui concentrator solar luminescent eficient.

➤ **PN 16 14 03 11. Compuși organici cu sulf bioactivi izolați din flora autohtonă.** Acesta a avut în componența lui etapa:

- Aspecte teoretice privind stadiul actual al extracției și utilizării compușilor organici bioactivi cu sulf. Proiectul a propus extracția compușilor organici bioactivi cu sulf din plante ce aparțin florei autohtone. Plantele producătoare de compuși cu sulf (organic sulphur compounds-OSC) sunt cunoscute de milenii și au fost apreciate ca alimente de bază, produse condimentare sau plante medicinale. În prima etapa, a fost prezentat un studiu complex de literatură care a arătat posibilitățile de extractie, de analiză și de utilizare a acestor compuși.

➤ **PN 16 14 03 12. Comportarea agregatelor pe baza de derivati porfirinici in functie de conditiile de generare, materiale inovative cu aplicativitate in domeniul energetic si in senzoristica.** Acesta a avut în componența lui etapa:

- Studiu de literatură asupra derivațiilor porfirinici și a metodelor de investigare a agregatelor cu caracter porfirinic, atât în soluții cât și pe substraturi solide

Proiectul a fost structurat pe două faze, din care prima a fost realizată și finanțată: *Studiu de literatură asupra derivațiilor porfirinici și a metodelor de investigare a agregatelor cu caracter porfirinic, atât în soluții cât și pe substraturi solide.*

Obiectivul fazei a fost îndeplinit cu succes, fiind realizat un studiu al literaturii de specialitate cu accent pe ultimele noutăți în domeniu. Studiul cuprinde: noțiuni generale despre porfirine și derivații porfirinici, importanța studiului fenomenelor de agregare ale porfirinelor și prezentarea unor studii în care agregatele porfirinice au fost caracterizate folosind diferite metode de investigare.

➤ **PN 16 14 03 14. Dezvoltarea de materiale fotocatalitice pentru obtinerea de combustibil alternativ prin conversia energiei solare.** Acesta a avut în componența lui etapa:

- Studiul literaturii de specialitate și obtinerea materialelor fotocatalitice de calcogenuri și ortoferite în diferite condiții de sinteză

În cadrul etapei proiectului a fost studiată literatura, atât în ceea ce privește utilitatea materialelor selectate pentru cercetare cat și potentialul fotocatalitic pe care îl prezintă. S-a stabilit metoda de obținere cea mai adecvata în scopul obținerii materialelor preconizate și analiza lor prin diferite metode fizico-chimice. În final s-a efectuat testul gas cromatograf pentru demonstrarea capacității fotocatalitice de descompunere a apei.

Rezultatele XRD confirmă obținerea materialelor calcogenice de tip Cd<sub>x</sub>Zn<sub>1-x</sub>S (hexagonal) și CdS (cubic). În cazul materialului CdS/ZnS/La<sub>2</sub>O<sub>3</sub> rezultatele de la XRD demonstrează prezența a La<sub>2</sub>ZnO<sub>x</sub> și CdS cubic.

Latimea picurilor din spectre indica faptul că materialele CdS/ZnS au dimensiune mult mai mică a cristalitelor comparativ cu CdS/ZnS/La<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. În cazul LaFeO<sub>3</sub> și YFeO<sub>3</sub>, a fost prezentă o singura fază. Toate rezultatele obținute corespund cu cele obținute în literatura, prezența a CdS pe lângă fază predominantă având un rol benefic în ceea ce privește fotocataliza. În literatura de cele mai dese ori se formează o pelicula de CdO pe suprafață care în cazul actual al studiului a fost sub formă de CdS. Aceasta pelicula este diferențiată în funcție de precursorii folosiți.

Din rezultatele Uv-Vis au fost extrase benziile interzise pentru fiecare material care a demonstrat că materialele calcogenice sunt potrivite pentru descompunerea pălei, în timp ce materialele pe baza de Y și La fără Cd nu prezintă potential în acest sens.

Rezultatele obținute prin metoda BET prezintă izoterme de tipul IVa cu histeriza de tipul H1 pentru DC29 și H3 în cazul DC28 și DC32. Cu variația concentrației de Zn s-a observat creșterea constantă a suprafeței specifice, DC29 având valoarea maximă de 90m<sup>2</sup>/g. Marirea concentrației de Zn influențează de asemenea

dimensiunea porilor determinata prin metoda de calcul DFT, aceiasi tendinta fiind observata si in cazul dimensiunii porilor calculata prin BJH. Rugozitatea are de asemenea o tendinta de scadere cu cresterea concentratiei de Zn. La<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, LaFeO<sub>3</sub> si YFeO<sub>3</sub> nu a prezentat porozitate astfel ca metoda BET nu este aplicabila pentru aceste materiale.

In concluzie s-a demonstrat prin GC ca suprafata specifica are cea mai mare influenta in studiul actual al photocatalizatorilor, de unde s-a conclus ca cu cresterea suprafatei specifice se asigura cresterea numarului de centrii activi care sunt responsabili pentru schimbul ionic si totodata pentru descompunerea apei.

## 2.2. Proiecte contractate:

Cod obiectiv	Nr. proiecte contractate	Nr. proiecte finalizate	Valoare (mii lei)		Total (lei)
			2016	2017	
1. PN 16 14 01	3	3	590.000	620.000	1.210.000
2. PN 16 14 02	11	9	1.435.465	2.534.067	3.969.532
3. PN 16 14 03	15	12	1.868.030	3.142.763	5.010.793
Total:	29	24	3.893.495	6.296.830	10.190.325

## 2.3 Situatia centralizata a cheltuielilor privind programul-nucleu : Cheltuieli în lei

	lei		
	2016	2017	Total
I. Cheltuieli directe	1.723.147	2.663.710	4.386.857
1. Cheltuieli de personal	1.625.865	2.473.322	4.099.187
2. Cheltuieli materiale și servicii	97.282	190.388	287.670
II. Cheltuieli Indirecte: Regia	2.150.600	3.577.748	5.728.348
III. Achiziții / Dotări independente din care:	19.748	55.372	75.120
1. pentru construcție/modernizare infrastructura	0	0	0
<b>TOTAL ( I+II+III)</b>	<b>3.893.495</b>	<b>6.296.830</b>	<b>10.190.325</b>

## 3. Analiza stadiului de atingere a obiectivelor programului (descriere)

Activitatile de cercetare din cadrul Programului Nucleu **PN 16 14 TEHNOLOGII, MATERIALE ȘI PRODUSE SUSTENABILE / TEMAPS**, prevazute pentru anul 2016, au fost indeplinite.

In continuare sunt prezentate principalele cercetari realizate, concretizate in rapoarte de cercetare, in conformitate cu propunerile initiale, corespunzatoare obiectivului propus.

### Obiectivul PN 16 14 01. ENERGIE

- studiul bibliografic al bateriilor solare reincarcabile obtinute prin integrarea unor celule solare sensibilizate cu colorant (DSSCs) de tip *n* si a unei baterii cu electrolit apoi pe baza de Li si Na;
- proiecte de tehnologii de laborator pentru obtinerea de nanotuburi si nanobare de TiO<sub>2</sub>, cat si a materialelor cu structura stratificata de tipul A(Li, Na)B(Co,Cr,Mn)O<sub>2</sub>;
- nanotuburi si nanobare de TiO<sub>2</sub>, cat si materiale cu structura stratificata de tipul A(Li, Na)B(Co,Cr,Mn)O<sub>2</sub>;
- tehnologia hidrotermala de obtinere a nanotuburilor si nanobarelor de TiO<sub>2</sub>, cat si a materialelor cu structura stratificata de tipul A(Li, Na)B(Co,Cr,Mn)O<sub>2</sub>;
- sintetizarea materialelor FeCO<sub>3</sub>, Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> si Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> prin metoda hidrotermala asistata de microunde si respectiv prin descompunerea termica in mediul controlat;

- caracterizarea materialelor obtinute prin tehnici ca: microscopie electronica de transmisie, spectroscopie de raze X dispersiva in energie, difractie de raze X, microscopie electronica cu scanare, spectrometrie Raman, spectrometrie UV-VIZ de reflectanta difusa, spectrometrie FTIR, termogravimetrie, analiza termica differentiala si porozimetrie;
- inglobarea nanoparticulelor magnetice sintetizate in polimetacrilat de metil si obtinerea de filme subtiri avand grosimea mai redusa de 10 micrometri care se pot prezenta ca suport ieftin pentru incarcare cu photocatalizator;
- actualizarea datelor bibliografice cu privire la obtinerea materialelor piezoelectrice flexibile „prietenoase” mediului;
- prezentarea si descrierea metodelor de caracterizare ale materialelor piezoelectrice flexibile;
- descrierea modelului electric de convertire a energiei mecanice in energie electrica, utilizind piezoelemente flexibile;
- studiu bibliografic al bateriilor solare reincarcabile obtinute prin integrarea unor celule solare sensibilizate cu colorant (DSSCs) de tip  $n$  si a unei baterii cu electrolit apoi pe baza de Li si Na;
- proiecte de tehnologii de laborator pentru obtinerea de nanotuburi si nanobare de  $TiO_2$ , cat si a materialelor cu structura stratificata de tipul  $A(Li, Na)B(Co, Cr, Mn)O_2$ ;
- nanotuburi si nanobare de  $TiO_2$ , cat si a materialelor cu structura stratificata de tipul  $A(Li, Na)B(Co, Cr, Mn)O_2$ ;
- tehnologia hidrotermala de obtinere a nanotuburilor si nanobarelor de  $TiO_2$ , cat si a materialelor cu structura stratificata de tipul  $A(Li, Na)B(Co, Cr, Mn)O_2$ ;
- sinteza si caracterizarea photocatalizatorilor de tip  $PdS/CdS/ZnS$ ;
- fabricarea suporturilor hibride magnetice de tip polimer/particula anorganică pentru suportarea photocatalizatorilor calcogenici activi în vizibil;
- suportarea photocatalizatorilor pe suporturi cu proprietati magnetice;
- experimente de photocataliza utilizand sulfuri binare suportate si nesuportate;
- realizarea unui setup experimental compus din sursa monocromatica de lumina, corp al fotoreactorului si benzi polimerice incarcate cu photocatalizator;
- metode de laborator optimizate pentru obtinerea materialelor piezoelectrice fara plumb, pe baza de Niobat de Sodiu si Potasiu modificat cu perovskiti de tipul  $GdB0_3$  si  $SmB0_3$  ( $B=Co, Mn, Cr, Fe, Al$ ), utilizati la fabricarea piezoelementelor flexibile;
- identificare si discutii asupra tranzitiilor de faza cristalina observate in cazul doparilor studiate;
- determinarea parametrilor celulei elementare pentru materialele studiate.
- noi proiecte de cercetare-dezvoltare in cadrul planului national sau programe ale UE, pe baza rezultatelor științifice obtinute;
- participare la retele de cercetare interne și internaționale;
- publicarea unor lucrări în reviste de specialitate din țară și din străinătate.

#### **Obiectivul PN 16 14 02. MEDIU**

- demonstrarea posibilitatii de utilizare a resveratrolului ca inhibitor de coroziune;
- obtinerea unor date referitoare la vitezele de coroziune ale otelului carbon si a otelului inoxidabil in solutii sintetice in prezenta si in absenta resveratrolului;
- sinteza materialelor hibride pe baza de carbune activ si nano-dioxid de titan nedopat si dopat cu ioni de argint (Ag) prin metode conventionale (sol-gel, hidrotermal clasic) si neconventionale (hidrotermal in camp de microunde);
- analiza morfologica si elementala a materialelor obtinute prin microscopie electronica de baleiaj;
- testarea materialelor hibride selectate in urma caracterizarii acestora, in procesele de adsorbție si photocataliza pentru indepartarea materiei organice de tipul acizilor humici din apa;

- evaluarea comparativa a eficientei photocatalitice si de adsorbtie a unor materiale hibride pe baza de carbune activ pulbere si sub forma granulata, functionalizat cu particule de TiO<sub>2</sub> aplicate in procesul de degradare a acidului humic;
- obtinerea materialelor nanostructurate de tip oxizi pseudo-binari Mg<sub>x</sub>(Ta<sub>1-y-z</sub>Nb<sub>y</sub>)<sub>2</sub>O<sub>w</sub> unde x=1, 3; y=0, 0.33, 0.1, 0.05, 1; z=0, 0.33, 0.1, 0.05, 1; w=6, 8 cu proprietati anticorozive utilizand metoda din stare solida si metoda hidrotermala;
- realizarea filmelor subtiri monostrat si a filmelor subtiri nanostructurate de tip sandwich folosind nanomateriale de tip Mg<sub>x</sub>(Ta<sub>1-y-z</sub>Nb<sub>y</sub>)<sub>2</sub>O<sub>w</sub> unde x=1, 3; y=0, 0.33, 0.1, 0.05, 1; z=0, 0.33, 0.1, 0.05, 1; w=6, 8 obtinute prin metoda hidrotermala si metoda din stare solida;
- obtinerea filmelor subtiri prin doua metode: PLD si drop-casting;
- elaborarea unui studiu asupra tehniciilor de depunere a filmelor subtiri oxidice cu diverse aplicatii, precum si a proprietatilor materialelor de depus;
- studiul aplicatiilor filmelor ce urmeaza a fi depuse prin tehnica PLD;
- studiu de literatură referitor la situatia actuală a metodelor de extractie si analiză a reziduurilor de pesticide din cereale și alimente;
- studiu de documentare stiintifica referitor la lucrările in domeniu si evolutia inregistrată in stiinta si industrie urmarind avantajele economice si de crestere a performantelor mecanice (putere marita si consum redus), pentru a intinge mai bine mecanismul de functionare al sistemului;
- studiul variantelor constructive si avantajele/dezvantajele diferitelor tipuri de electrolizor folosite pentru obtinerea hidrogenului, pentru a alege varianta optima de proiectare si constructie a modelului experimental;
- realizarea de calcule DFT preliminare utilizand un pachet soft CRYSTAL14, precum si operatii de standardizare a celulei elementare a unor compusi delafozitici de tip ABO<sub>2</sub> (FeCuO<sub>2</sub>, GaCuO<sub>2</sub>, CrCuO<sub>2</sub>);
- calcularea structurilor de benzi energetice, densitatea de stari electronice pe fiecare atom al retelelor cristaline, densitatile de sarcina electronice;
- reducerea vitezei de coroziune a oțelurilor utilizate in procesele de vinificatie;
- reducerea conținutului de metale grele în vinuri și a impactului asupra mediului și a sănătății oamenilor.
- obtinerea si caracterizarea unor noi materiale hibride „low cost” cu proprietati avansate de adsorbtie/ fotocataliza;
- dezvoltarea unui nou concept de tratare avansata a apei pentru potabilizare;
- noi materiale care pot folosite cu succes in procesele de adsorbtie si fotocataliza pentru indepartarea compusilor organici de tipul acizilor humici din apa;
- demonstrarea viabilitatii efectului dioxidului de titan in prezenta luminii UV asupra suprafetei carbunelui activ pulbere asigurand activitatea de autocuratare, facandu-l astfel potrivit pentru tratarea avansata a apei potabile in timpul proceselor de fotocataliza;
- realizarea prin sinteza din stare solida si sinteza prin metoda hidrotermala in anumite conditii de noi nanomateriale cu structura oxidica pseudo-binara de tip Mg<sub>x</sub>(Ta<sub>1-y-z</sub>Nb<sub>y</sub>)<sub>2</sub>O<sub>w</sub> unde x=1, 3; y=0, 0.33, 0.1, 0.05, 1; z=0, 0.33, 0.1, 0.05, 1; w=6, 8;
- obtinerea filmelor subtiri de tip monostrat si / sau sandwich;
- testarea filmelor subtiri ca inhibitori de coroziune in mediu salin sau acid;
- demonstrarea protectiei anticorozive in cazul tuturor electrozilor modificati prin depuneri de filme subtiri;
- demonstrarea faptului că tensiunea din filmele subtiri de SnO<sub>2</sub> de diferite grosimi, poate fi o modalitate eficientă de a stabili diferențele care apar în valoarea benzii interzise a acestora;
- demonstrarea faptului că deformatia este o modalitate eficientă de a controla deplasarea de bandă a filmelor de SnO<sub>2</sub> și sugerează că ingineria deformatiei este o cale atrăgătoare pentru a controla proprietățile optice ale semiconducatorilor de oxid;

- obtinerea filmelor subțiri oxidice epitaxiale - de o importanță extraordinară datorită aplicabilitatii promițătoare a acestora într-o gamă largă de domenii tehnologice, inclusiv cele optice, electronice, optoelectronice și biologice;
- studiul și determinarea concentrațiilor unor erbicide și insecticide prin diverse metode în câteva cereale cultivate în Banat: grâu, porumb, rapiță;
- studiul patentelor de inventii și a diverselor lucrari experimentale din mediul academic și non-academic și a lucrarilor care urmaresc avantajele economice și de creștere a performantelor mecanice (putere marita și consum redus), pentru a intelege mai bine mecanismul de functionare al sistemului;
- studiul variantelor constructive și a avantajelor/dezvantajelor diferitelor tipuri de electrolizor folosite pentru obtinerea hidrogenului, pentru a alege varianta optima de proiectare și construcție a modelului experimental;
- finalizarea fazei de concept, proiectare, detaliere și achiziția unor componente necesare pentru construcția și montajul instalației experimentale;
- realizarea unui studiu bibliografic cuprinzător și relevant pentru identificarea celor mai nocivi poluanți din zonele urbane caracterizate de trafic intens ;
- determinarea condițiilor experimentale optime pentru identificarea densității volumetrice a particulelor (PM) existente într-o zonă urbană caracterizată de trafic intens ;
- ilustrarea unei harti 3D a poluanților identificați, cu ajutorul programelor software specifice prelucrării datelor de acest tip ;
- elaborarea unui studiu amanuntit referitor la epurarea apelor uzate prin electrocoagulare folosind electrozi de aluminiu;
- proiectarea sistemului de electrocoagulare pentru epurarea apelor uzate;
- contributii la dezvoltarea unui Laborator de Chimie-Fizica Structurala și Computationala;
- editarea material didactic de initiere în tehnici de analiza quanto-chimica prin utilizarea softului CRYSTAL 14 pentru calcule *ab initio*;
- realizarea calculelor pentru o serie de proprietati de material, pentru structuri delafositice FeCuO<sub>2</sub>/GaCuO<sub>2</sub>/CrCuO<sub>2</sub> precum și ZnS/CdS;
- noi proiecte de cercetare-dezvoltare în cadrul planului național sau programe ale UE, pe baza rezultatelor științifice obținute;
- participare la rețele de cercetare interne și internaționale;
- publicarea unor lucrări în reviste de specialitate din țară și din străinătate.

#### **Obiectivul PN 16 14 03. MATERIALE, PROCESE ȘI PRODUSE INOVATIVE**

- analiza grafenei cu defecte topologice, precum și a precursorilor ei organici, ca sursă de puncte cuantice (quantum-dots, QD) dinamice;
- clarificarea și re-formularea următoarelor concepte fundamentale din chimie-fizică: conceptul de "spațiu al proprietăților chimice" se aplică deopotrivă unor serii de molecule de polietilenamină lineare și ramificate, în stare naturală și după docare (precursori de nanosisteme cu carbon) ca și la nano-interacții pe sisteme de carbon jucătăuse; aromaticitatea coreleză cu gradul de izomerism pentru o serie de hidrocarburi policiclice aromatice; efectul de acumulare topologică a golurilor apare în rețelele de tip "fagure de miere" pe supercelule de grafen;
- prezenta abordare bondonică/bondotică a punctelor cuantice (bi-puncte cuantice/quantum double dots, QDD sau QD<sub>2</sub>=D) la nivelul sistemelor fotovoltaice sustenabile cu grafene se realizează prin modelarea și controlul bi-punctelor cuantice în celule Schottky cu bistrat de grafene;
- realizarea de pelicule subțiri epitaxiale de SnO<sub>2</sub> și WO<sub>3</sub> prin tehnica ablatiei laser;
- doparea peliculei subțiri cu ioni de heliu pentru ameliorarea caracteristicilor de material;
- caracterizarea fizico chimica și morfologica a structurilor obținute;

- actualizarea studiilor bibliografice prin realizarea unei baze de date referitoare la metodele de obtinere a filmelor subtiri de  $TiO_2$ , precum si metode de depunere in-situ a oxidului de wolfram direct din precursori pe suprafata filmelor subtiri de  $TiO_2$  in vederea dezvoltarii unor filme subtiri multi-strat de tipul  $TiO_2/WO_3$ ;
- sintetizarea materialelor perovskitice de tipul  $ABO_3$  prin diferite metode: metoda sol-gel, metoda coprecipitarii, urmate de tratamente termice la diferite temperaturi si diferiti timpi de calcinare; caracterizarea materialelor obtinute;
- studiul stabilitatii termice a antocianinelor: cianidin-3-glucozida (Cy-3-Glu) si malvidin-3-glucozida (Mv-3-Glu) si realizarea unor teste de degradare accelerata;
- obtinerea si caracterizarea microparticulelor de carbonat de fier cu structura monocrystalina si cu dimensiuni controlate: actualizarea bazei de date, caracterizarea XRD, EDAX si SEM a particulelor de carbonat de fier obtinute, stabilirea limitelor de temperatura si timp intre care este favorizata cristalizarea carbonatului de fier prin cercetarea efectuata asupra descompunerii complexului  $FeNa4EDTA$  in prezena ureei;
- obtinerea de magnetita mezocrystalina prin tratamentul termic controlat al monocristalelor de carbonat de fier si caracterizarea acestora prin: difractie de raze X (caracterizarea structurii cristaline), microscopie electronica cu scanare, TEM (caracterizarea morfologica), analiza EDAX (analiza EDAX), VSM, SQUID, histeresigraf (caracterizarea magnetica), studierea ordinii magnetice prin spectrometrie Mosbauer;
- obtinerea prin iradierea in camp de microunde a 6 compusi: 1 amida, N-(2-bromo-fenil)-2-hidroxi-benzamida, mentionata in literatura de specialitate, 2 esteri, unul etilic, [2-(2-bromo-fenilcarbamoyl)-fenoxi]-acetatul de etil si unul metilic, [2-(2-bromo-fenilcarbamoyl)-fenoxi]-acetat de metil, compusi noi, o hidrazida, N-(2-bromo-fenil)-2-hidrazinocarbonilmethoxy-benzamida, precum si 2 hidrazone 2-(5-bromo-2-hidroxybenziliden-hidrazinocarbonilmethoxy)-N-(2-bromo-fenil)-benzamida si N-(2-bromo-fenil)-2-(4-dimetilamino-benziliden-hidrazinocarbonilmethoxy)-benzamida;
- caracterizarea completa a compusilor sintetizați prin analizarea prin metode moderne de analiză, IR, RMN, analiza elementala;
- clarificarea si re-formularea urmatoarelor concepte fundamentale din chimie-fizică:
  - conceptul de "spatiu carbon-activ" pentru structurile bazate pe nanostructuri extinse de carbon, proiectate topologic si caracterizate prin energia de activare corelată cu indicii topologici energetic de tip Wiener;
  - conceptul de "cinetică moleculară foto-activată", cu analiza oferită de mașinile moleculare, pe baza componentelor structurale, rotaxani și catenane, și a combinațiilor complexe ale acestora în navete moleculare, sau cicluri moleculare cu rol în conversia energiei sau în transportul de sarcină, de informație chimică (activarea reactivității și cataliză cotrolată), etc.;
  - posibilitatea de a evidenția existența bondonului prin acțiune la distanță, viy; reactivitatea indusă la distanță, prin "unda bondonică" în spațiul carbonului activ; fie prin cuplare-decuplare electronică, la nivelul femtosecundelor, în regimul timpului de viață al bondonilor, sub foto-control; posibilitatea de a cupla cele două concepte de mai sus prin depozitarea-depunerea-sinteza direct a mașinilor moleculare pe nano-suprafete extinse de carbon deschide posibilitatea unor "circuite integrate" nano-moleculare, cu mare potențial aplicativ;
- dezvoltarea de noi materiale necesare in diverse aplicatii precum in protecția mediului, cat si in energetica solară;
- controlarea proprietăților filmelor epitaxiale obtinute prin tehnica ablației laser, prin modificarea parametrilor de depunere, utilizând o metoda revoluționară ce conduce la obtinerea de filme epitaxiale cu proprietăți performante;
- studiu asupra obtinerii de filme subțiri epitaxiale cu proprietăți controlabile, asupra aplicabilității filmelor subțiri cu proprietăți superioare obtinute prin diferite metode, precum si asupra determinarii si investigarii ai parametrilor necesari obtinerii de filme subțiri cu proprietăți avansate;
- obtinerea filmelor subțiri epitaxiale cu grosimea mai mica de 30 nm cu structura si cristalinitate orientata;

- doparea structurii astfel obținute cu ioni de heliu pentru a obține o structură cu proprietăți superioare a fost efectuata;
- caracterizarea fizico chimica a filmelor obținute prin metoda nouă de implantare de ioni de heliu;
- sinteze de laborator pentru obținere de filme subțiri de  $TiO_2$  pe substraturi diferite prin metode avansate;
- caracterizarea structurală și morfologică a filme subțiri de  $TiO_2$  obținute;
- realizarea metodologii optimizate pentru obținerea filmelor subțiri de  $TiO_2$  prin metodele propuse, filme subțiri de  $TiO_2$  nedopat;
- obținerea materialelor pervașkitice multifunctionale prin metode conventionale: tehnologia ceramica și metoda sol-gel urmata de tratament termic la diferite temperaturi și prin metode alternative: metoda ultrasonica cu sonotroda imersată în mediul de reacție și metoda hidrotermală asistată în camp de microunde (de la fotocataliza la conversie de energie);
- studiul proprietăților morfo-structurale ale materialelor obținute;
- studiul posibilității îmbunătățirii stabilității antocianinelor la tratament termic prin adiția unor cofactori atât în probe de antocianine pure cât și în extracte naturale de antocianine;
- testarea compușilor sintetici (quercitină, acid citric) și a extractelor de plante (rozmarin, cimbru) cu caracter oxidant puternic;
- evaluarea procesului de degradare prin aplicarea unui model de cinetică de ordinul 1 și calculul parametrilor cinetici;
- îmbunătățirea activității antioxidantă a antocinelor pure cât și a extractelor naturale de antocianine prin adiția cofactorilor;
- demonstrarea posibilității obținerii de cristale de maghemită poroasă, de dimensiuni submilimetrice, romboedrice cu suprafață specifică mare ( $40,14 \text{ m}^2 / \text{g}$ ) de obicei asociată cu cristalite de dimensiuni nanometrice;
- posibilitatea utilizării cristalelor de maghemită poroasă datorită dimensiunilor mari ( $150 \mu\text{m}$ ) și a cristalinitatii înalte într-o arie largă de aplicații, în special ca suporturi magnetice, senzori de gaz și electrozi pentru baterii de Li-ion; dimensiunile cristalelor sunt suficiente de mari și rezistente la acțiunile mecanice, și permit atașarea unui contact electric;
- evaluarea celor 6 compuși sintetizați într-o fază anterioară (2016), facând parte din clasa salicilanilidei, esteri, hidrazide, hidrazone, prin trei metode chimice, DPPH, ABTS, FRAP, și una electrochimică, voltametria ciclică și determinarea activității antioxidantă a acestora;
- includerea compușilor [2-(2-bromo-fenilcarbamoi)-fenoxi]-acetatul de etil (ester etilic), N-(2-bromo-fenil)-2-hidrazinocarbonilmethoxybenzamida (hidrazida), 2-(5-bromo-2-hidroxi-benziliden-hidrazinocarbonilmethoxy)-N-(2-bromo-fenil)-benzamida (hidrazone) în  $\beta$ -ciclodextrina, pentru a le îmbunătăți solubilitatea în apă (biodisponibilitatea) și eficiența moleculelor de medicament incluse, în organismele vii;
- caracterizarea complexelor obținute, în fază lichidă și solidă, prin spectroscopie IR, RMN, spectrofotometrie UV-VIS, difracție RX, SEM;
- construirea și validarea a noi senzori care pot fi utilizati la scanarea urinei și sangelui pentru detectia precoce a leucemiei;
- obținerea de materiale luminescente, doparea lor cu ioni ai lantanidelor;
- caracterizarea fizico-chimică a acestor materiale;
- înglobarea pulberilor în polimeri transparenti;
- identificarea unui material eficient, candidat pentru fabricarea a unui concentrator solar luminescent eficient realizat prin înglobarea nano pulberilor în PMMA și obținerea emisiei luminoase la iluminare cu lumina UV și albastră;
- extracția compușilor organici bioactivi cu sulf din plante ce aparțin florei autohtone;
- studiu complex de literatură care a arătat posibilitatile de extractie, de analiză și de utilizare a compușilor organici bioactivi cu sulf;

- studiu asupra noțiunilor generale despre porfirine și derivații porfirinici;
- importanța studiului fenomenelor de agregare ale porfirinelor;
- prezentarea unor studii în care aggregatele porfirinice au fost caracterizate folosind diferite metode de investigare;
- studiu de literatura referitor la utilitatea materialelor fotocatalitice selectate pentru cercetare cat si a potentialul lor fotocatalitic;
- stabilirea celei mai adevărate metode de obținere a materialelor fotocatalitice preconizate si analiza lor prin diferite metode fizico-chimice;
- demonstrarea prin GC a influenței suprafatei specifice asupra fotocatalizatorilor;
- noi proiecte de cercetare-dezvoltare in cadrul planului national sau programe ale UE, pe baza rezultatelor științifice obținute;
- participare la rețele de cercetare interne și internaționale;
- publicarea unor lucrări în reviste de specialitate din țară și din străinătate.

#### 4. Prezentarea rezultatelor:

##### 4.1. Valorificarea în producție a rezultatelor obținute:

	Denumirea proiectului	Tipul rezultatului	Efecte scontate
1	<b>PN 16 14 01 01.</b> Realizarea unor baterii solare reincarcabile pe baza de materiale cu structura stratificata obtinute prin metoda hidrotermala	Raport de cercetare, proiecte de tehnologie, participari conferinte	Obiectivul initial propus pentru prima etapă a fost indeplinit in totalitate, fiind finalizate toate obiectivele specifice asumate in cadrul etapei I a acestui proiect.
		Raport de cercetare, proiecte de tehnologie, participari conferinte	Obiectivul initial propus a fost indeplinit in totalitate, fiind finalizate toate obiectivele specifice asumate in cadrul acestui proiect.
2	<b>PN 16 14 01 02.</b> Micropulberi magnetice pentru descompunerea fotocatalitică a apei cu ajutorul luminii solare	Studiu proiect, lucrari stiintifice prezentate si publicate la conferinte de profil	Obiectivele proiectului s-au atins dupa prima etapa in proportie de aproximativ 40%.
		Studiu proiect	Studiu definitivat
3	<b>PN 16 14 01 03.</b> Piezoelemente flexibile fara plumb destinate producerii energiei electrice	Raport de cercetare, metode de obtinere, metode de caracterizare, participari conferinte, lucrari stiintifice.	Faza 1/2016: Studiu bibliografic si actualizarea datelor stiintifice privind obtinerea si caracterizarea materialelor piezoelectrice flexibile
		Raport de cercetare, metode de obtinere, metode de caracterizare, participari conferinte.	Au fost elaborate metode de laborator optimizate pentru obtinerea materialelor piezoelectrice fara plumb, pe baza de Niobat de Sodiu si Potasiu modificat cu perovskiti de tipul GdB <sub>3</sub> O <sub>3</sub> si SmB <sub>3</sub> O <sub>3</sub> (B=Co, Mn, Cr, Fe, Al), utilizati la fabricarea piezoelementelor flexibile. Au fost identificate si discutate tranzitiile de faza cristalina observate in cazul doparilor studiate. Au fost determinati parametrii celulei elementare pentru materialele studiate.
4	<b>PN 16 14 02 01.</b> Coroziunea otelurilor in vinuri. Influenta polifenolilor naturali asupra	Raport de cercetare	Obiectivul general initial propus pentru prima etapă a fost indeplinit

	vitezei de coroziune a otelurilor utilizate in procesele de vinificatie		in totalitate, fiind finalizate toate obiectivele specifice asumate in cadrul etapei I a acestui proiect.
		Date experimentale noi Reducerea vitezei de coroziune a oțelurilor utilizate in procesele de vinificatie Reducerea conținutului de metale grele în vinuri și a impactului asupra mediului și a sănătății oamenilor	Obiectivul general initial propus a fost indeplinit in totalitate, fiind finalizate toate obiectivele specifice asumate in cadrul acestui proiect
5	<b>PN 16 14 02 02.</b> Obtinerea si testarea unor materiale hibride inovative cu cost scazut, utilizate in procesele avansate de tratare a apei	Baza de date tehnico-stiintifice care contine informatii la zi asupra domeniului abordat; tehnici modernizate pentru abordarea unor cercetari fundamentale privind obtinerea unor noi materiale hibride pe baza de carbur activ si nano-dioxid de titan	Obiectivul general initial propus a fost indeplinit in totalitate, fiind finalizate toate obiectivele specifice asumate in cadrul acestui proiect pentru primele două etape.
		Baza de date tehnico-stiintifice care contine informatii la zi asupra domeniului abordat; tehnici modernizate pentru abordarea unor cercetari fundamentale privind obtinerea unor noi materiale hibride pe baza de carbur activ si nano-dioxid de titan	Obiectivul general initial propus a fost indeplinit in totalitate, fiind finalizate toate obiectivele specifice asumate in cadrul acestui proiect.
6	<b>PN 16 14 02 03.</b> Obtinerea si caracterizarea fizico-chimica a filmelor subtiri folosind materiale de tip $Mg_x(Ta_{1-y-z}Nb_y)_2O_w$ cu proprietati anticorozive	Nanomateriale si filme subtiri	Obiectivele proiectului s-au atins dupa prima etapa in proportie de aproximativ 67%
		Produse program	Finalizat
7	<b>PN 16 14 02 04.</b> Dezvoltarea unor noi materiale necesare in energetica si mediu	Studiu de literatura cuprinzând tehnicile de depunere a filmelor subtiri oxidice si aplicatiile acestora, cu evidențierea parametrilor de optimizare a cresterii filmelor subtiri	Raport etapa 1 realizat
		Raport de cercetare	Studiile au demonstrat faptul că tensiunea din filmele subtiri de $SnO_2$ de diferite grosimi, poate fi o modalitate eficientă de a stabili diferențele care apar în valoarea benzii interzise a acestora. Acest studiu demonstrează că deformatia este o modalitate eficientă de a controla deplasarea de bandă a filmelor de $SnO_2$ și sugerează că ingineria deformatiei este o cale atrăgătoare pentru a controla proprietățile optice ale semiconducțorilor de oxid. Filmele

			subțiri oxidice epitaxiale sunt de o importanță extraordinară datorită aplicabilitatii promițătoare a acestora într-o gamă largă de domenii tehnologice, inclusiv cele optice, electronice, optoelectronice și biologice.
8	<b>PN 16 14 02 05.</b> Determinarea unor pesticide din cereale cultivate in Banat	Studiu proiect	Obiectivul propus în: Faza I/2016, Elaborarea unui studiu actualizat de literatură, a fost realizat în totalitate.
		Studiu proiect	In vederea urmaririi efectelor lanțului: plantă-sol-mediu-om-pesteicide au fost considerate ca fiind de maxima importanță și au fost realizate: -elaborarea unor protocoale interne de extractie a pesticidelor din cereale; -elaborarea unor metode rapide de analiza, analiza HPLC, specific fiecarui compus cu acțiune insecticida sau erbicida luat în studiu; -stabilirea unor intervale de concentrație de detectie.
9	<b>PN 16 14 02 06.</b> Hidrogenul pe post de catalizator pentru reducerea emisiilor de tip "PM" in gazele de esapament la motoarele cu Combustie Interna (CI)	Studiu de literatura	Raport faza 1 realizat
10	<b>PN 16 14 02 07.</b> Analiza computationala si modelarea predictiva a materialelor pe baza de oxid delaositic ABO2 si de solutii solide de tip wurtzit CdS/ZnS	Proiectare de materiale noi	Calcule preliminare DFT pentru compusi delaositici; obiectivul initial propus pentru prima etapă a fost indeplinit
		Proiectare de materiale noi	realizarea calculelor pentru o serie de proprietăți de material, pentru structuri delaositice FeCuO <sub>2</sub> /GaCuO <sub>2</sub> /CrCuO <sub>2</sub> precum și ZnS/CdS; obiectivul initial propus pentru cea de-a doua etapă a fost indeplinit
11	<b>PN 16 14 02 09.</b> Biosistem hibrid de imbunatatire a calitatii aerului urban	Studiu proiect	Studiu definitivat
12	<b>PN 16 14 02 10.</b> Sistem modular adaptabil pentru epurarea apelor uzate	Studiul de literatură al procesului de epurare a apei prin electrocoagulare și proiectarea unei instalații de laborator pentru epurarea apei utilizând panouri fotovoltaice	S-a elaborat un studiu amanuntit în ceea ce privește epurarea apelor uzate prin electrocoagulare folosind electrozi de aluminiu. Deasemenea, proiectarea sistemului de electrocoagulare a fost pe deplin finalizată.
13	<b>PN 16 14 03 01.</b> Senzitivatoare fotovoltaice cu straturi de grafen. De la nanostructura de material la funcția supra-electroconducțoare	Raport de cercetare, lucrari științifice publicate	Obiectivul initial propus pentru prima etapă a fost indeplinit în totalitate, fiind finalizate toate obiectivele specifice asumate în cadrul etapei I a acestui proiect.
		Raport de cercetare, lucrari științifice publicate	Obiectivul initial propus pentru a doua etapă a fost indeplinit în totalitate, fiind finalizate toate obiectivele specifice asumate în cadrul etapei II a acestui proiect.
14	<b>PN 16 14 03 02.</b> Obtinerea de filme epitaxiale	Tehnologie de implantare ioni	Obiectivul propus a fost realizat

	cu proprietati controlabile prin tehnica ablatiei laser	de heliu la energie joasa	complet.
		Studiu	Au fost obtinute filme epitaxiale de SnO <sub>2</sub> si WO <sub>3</sub> prin ablatie laser de la o tinta stoichiometrica pe diferite suporturi monocristaline. Au fost studiate posibile aplicatii ale filmelor de WO <sub>3</sub> nedozate si dozate cu heliu, in domeniul photocatalizei si al senzoristicai. Ambele tipuri de filme prezinta activitate photocatalitica ridicata la degradarea rodaminei B, precum si raspuns electric la utilizarea acestuia ca senzor de umiditate. Proiectul atinge o temă foarte importantă pentru societatea științifică si anume posibilitatea de realizare a unor senzori de dimensiuni mici pentru detectarea rapida a umiditatii ridicata si reprezinta un punct de plecare pentru viitoarele teme de cercetare Obiectivele de faza au fost indeplinite si s-au realizat toate rapoartele de cercetare.
15	<b>PN 16 14 03 04.</b> Dezvoltarea de metode avansate privind obtinerea de filme subtiri de TiO <sub>2</sub> /WO <sub>3</sub>	Baza de date tehnico-stiintifice care contine informatii la zi asupra domeniului abordat	Obiectivul initial propus pentru prima etapă a fost indeplinit in totalitate
		Studiu	Studiu finalizat
16	<b>PN 16 14 03 05.</b> Dezvoltarea de materiale multifunctionale de tipul ABO <sub>3</sub> si studiul proprietatilor fizico-chimice caracteristice	Studiul proprietatilor fizico-chimice al materialelor multifunctionale de tipul ABO <sub>3</sub> Metode si tehnici de sinteza si caracterizare a materialelor perovskitice de tipul ABO <sub>3</sub> multifunctionale	Raport etapa 1 realizat
		Studiul proprietatilor fizico-chimice al materialelor multifunctionale de tipul ABO <sub>3</sub> Metode si tehnici de sinteza si caracterizare a materialelor perovskitice de tipul ABO <sub>3</sub> multifunctionale	Proiectul si-a atins obiectivele propuse.
17	<b>PN 16 14 03 06.</b> Soluții inovative de stabilizare a extractelor naturale pe bază de antocianine	Raport de cercetare	Obiectivul propus în cadrul fazei Faza: I/2016. Studiul stabilității termice a antocianinelor pure pe parcursul încălzirii și depozitării a fost îndeplinit în totalitate.
		Studiu	Studiu finalizat
18	<b>PN 16 14 03 07.</b> Obtinerea de oxizi de fier cu structura mezocristalina ca purtatori dirijati de medicamente pentru aplicatii biomedicale	Obtinerea si caracterizarea microparticulelor de carbonat de fier cu structura monocristalina si cu dimensiuni controlate. Obtinerea de magnetita mezocristalina prin	Obiectivul propus a fost indeplinit in totalitate, fiind finalizate toate obiectivele specifice asumate in cadrul acestui proiect pentru primele două etape.

		tratamentul termic controlat al monocristalelor de carbonat de fier și caracterizarea acestia.		
		Studiu proiect, raport de faza, oxizi de fier cu proprietati noi (mezocristaline)	Finalizate primele trei faze	
19	<b>PN 16 14 03 08.</b> Formulări topice pe bază de noi complecsi de inclusiune supramoleculară hidroxibenzamide-ciclodextrină	Raport de cercetare	Obiectivul propus in cadrul fazei Faza: I/2016. Sinteza în câmp cu microunde a hidroxibenzamidelor, esterilor, hidrazidelor, hidrazoneelor și caracterizarea acestora a fost realizat in totalitate	
20	<b>PN 16 14 03 09.</b> Dezvoltarea unor noi senzori bazati pe materiale inovative pentru determinarea precoce a leucemiei	Studiu	Studiu finalizat	
21	<b>PN 16 14 03 10.</b> Obținerea de materiale luminofore și estimarea aplicabilității lor pentru conversia radiației solare în energie electrică	Prototip – model validat in laborator de senzori pentru detectia precoce a leucemiei	Realizarea de produse-materiale optice	Obiectivele propuse in proiect au fost realizate.
22	<b>PN 16 14 03 11.</b> Compusi organici cu sulf bioactivi izolati din flora autohtona	studiu	Proiectul si-a atins obiectivele propuse pentru această etapă	finalizat
23	<b>PN 16 14 03 12.</b> Comportarea agregatelor pe baza de derivati porfirinici in functie de conditiile de generare, materiale inovative cu aplicativitate in domeniul energetic si in senzoristica	studiu	studiu de literatură, studii de laborator.	A fost elaborat studiul de literatură.
24	<b>PN 16 14 03 14.</b> Dezvoltarea de materiale photocatalitice pentru obtinerea de combustibil alternativ prin conversia energiei solare	Raport de cercetare	Obiectivele de faza au fost indeplinite.	

#### 4.2. Documentații, studii, lucrări, planuri, scheme și altele asemenea:

Tip	Nr. Total	64 în 2016	54 în 2017
Documentații		3	5
Studii		6	8
Lucrări		8	31
Planuri		0	-
Scheme		0	1
Altele asemenea (Spectre XRD, UV-VIS, RAMAN, FTIR, EDX, Imagini microscopie electronica, Brevete)		>30	2
Participări la conferinte		17	7

Din care:

##### 4.2.1. Lucrări științifice publicate în jurnale cu factor de impact relativ ne-nul (2016-2017):

Nr.	Titlul articolului	Numele Jurnalului, Volumul, pagina nr.	Nume Autor	Anul publicării	Scorul relativ de influență	Numărul de citări ISI

				<i>al articoului</i>		
1	Good quality factor in GdMnO <sub>3</sub> -doped (K <sub>0.5</sub> Na <sub>0.5</sub> )NbO <sub>3</sub> piezoelectric ceramics	<i>Journal of Electronic Materials</i> , 45 (6) (june 2016), 3046–3052	Raul Alin Bucur, Iuliana Badea, Alexandra Ioana Bucur, Stefan Novaconi	2016	1.491	0
2	Obtaining and characterization of Zn <sub>3</sub> V <sub>2</sub> O <sub>8</sub> and Mg <sub>3</sub> V <sub>2</sub> O <sub>8</sub> pseudo binary oxide nanomaterials by hydrothermal method	AIP Publishing – Conference Proceedings	Mihaela Birdeanu, Mirela Vaida, Daniel Ursu, Eugenia Fagadar-Cosma	Acceptata in 2016		
3	Strain-induced optical band gap variation of SnO <sub>2</sub> films	<i>Thin Solid Films</i> Volume 615, 30 September 2016, Pages 103–106, 2016 (I.F 1.761)	S. F. Rus, T. Z. Ward and A. Herklotz	2016	1.095	0
4	Continuously Controlled Optical Band Gap in Oxide Semiconductor Thin Films	<i>Nano Lett.</i> (2016) 16 (3), pp 1782–1786	Herklotz, S.F. Rus, T.Z. Ward	2016	14.154	2
5	Top-down synthesis of mesocrystalline α-Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> submillimeter-sized rhombohedrons	<i>Particulate Science and Technology</i> , Volume 34, 2016, Issue 5, pp:571-579.	Mihaela Luminita Kiss, Marius Chirita, Adrian Ieta, Liviu Sacarescu, Cecilia Savii	2016	0.434	0
6	Linear and Branched PEIs (Polyethylenimines) and Their Property Space	<i>International Journal of Molecular Sciences</i> 17(4) (2016) 555; DOI: 10.3390/ijms17040555 (Special Issue: Chemical Bond and Bonding 2016, Mihai V. Putz, guest editor)	Lungu C.N., Diudea M.V., Putz M.V. (*), Grudziński I.P.	2016	3.257	1
7	Carbon-Based Specific Adjacency-in-Bonding (SAIB) Isomerism Driving Aromaticity	<i>Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures</i> 24(12) (2016) 733-748; DOI: 10.1080/1536383X.2016.1219851	Putz M.V., Tudoran M.A.	2016	0.812	0
8	Cooperative topological	<i>Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures</i>	Ori O., Cataldo F.,	2016	0.812	0

	accumulation of vacancies in honeycomb lattices	24(6) (2016) 353-362; DOI: 10.1080/1536383X.2016.1155561	Putz M.V., Kaatz F., Bultheel A.			
	Synthesis of PdS/ZnS-Cds type photocatalysts using ZnS as sulphide source	Turkish Journal of Chemistry, DOI: 10.3906/kim-1702-44.	Radu Banica, Petrica Linul, Cristina Mosoarca	2017-2018	0.576	0
	"Symmetry driven control of optical properties in WO <sub>3</sub> films"	APL Materials 5, 066106 (2017)	A. Herklotz, S. F. Rus, S. KC, V. R. Cooper, A. Huon, E.-J. Guo si T. Z. Ward	2017	4.062	0
	Stability evaluation of some commercial anthocyanins	<i>Journal of Environmental Protection and Ecology</i>	Căta A., Ștefănuț M.N., Fițigău F., Vasziłcsin C., Ienașcu I.M.C.	Trimisă spre publicare	-	-
	Synthesis and characterization of some new 5-chloro-2-hydroxy-N-phenylbenzamide derivatives	Rev. Roum. Chim., 62(6-7), 475-479,	Ioana M.C. Ienașcu, Raluca O. Pop, Adina Căta, Mariana N. Ștefănuț, Iuliana M. Popescu	2017	0.186	0
	Topological Modeling of Carbon Nano-Lattices	Current Organic Chemistry vol. 21 Bentham Science Publishers doi : 10.2174/1385272821666170428123839 ISSN 1385-2728	Bogdan Bumbacila, Ottorino Ori, Franco Cataldo, and Mihai V. Putz	2017	2	0
	Molecular devices and machines: hybrid organic-inorganic structures	Current Organic Chemistry vol. 21 Bentham Science Publishers doi : 10.2174/1385272821666170531121733 ISSN 1385-2728	Margherita Venturi, Mirela Iorga, Mihai V. Putz	2017	2	0
	Bondonic Theory	Apple Academic Press & CRC Press, Toronto-New Jersey, Canada-USA Accepted, to be published	Mihai V. Putz	2018	-	0
	Bondonic topo-	Apple Academic Press & CRC Press,	Mihai V.	2018	-	0

	reactivity	Toronto-New Jersey, Canada-USA Accepted, to be published	Putz and Marina A. Tudoran			
	Powder Electrodeposition	Apple Academic Press & CRC Press, Toronto-New Jersey, Canada-USA Accepted, to be published	Marius C. Mirica, Marina A. Tudoran and Mihai V. Putz	2018	-	0
	Comparative methods for monitoring of imidacloprid residues in maize and wheat cultivated in Banat County	<i>Rev. Roum. Chim.</i> , 62(6-7), 525-530	M.N. Stefănuț, M. Dobrescu, C. Vaszilcsin, A. Căta, I.M.C. Ienașcu	2017	0.246	-

**4.2.2. Lucrări/comunicații științifice publicate la manifestări științifice (conferințe, seminarii, worksopuri, etc):**

Nr. crt.	Titlul articolului, Manifestarea științifică, Volumul, Pagina nr.	Nume Autor	An apariție	Nr. citări ISI
1	<i>Microwave assisted hydrothermal synthesis of FeCO<sub>3</sub>,</i> TIM 15-16 Physics Conference, Timisoara, Romania, 26-28 Mai 2016.	Cristina Mosoarca, Radu Banica, Petrica-Andrei Linul, Paula Svera, Marius Chirita,	2016	0
2	<i>Obtaining of 3D nanostructured α-Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> / Ag nanosheets ensembles,</i> TIM 15-16 Physics Conference, Timisoara, Romania, 26-28 Mai 2016.	Marius Chirita, Mihaela Luminita Kiss, Adrian Ieta and Radu Banica	2016	0
3	<i>Energy harvesting from bicycle vibrations using flexible lead-free piezoelectric materials,</i> Proceedings of the 22nd International Symposium on Analytical and Environmental Problems, University of Szeged, Department of Inorganic and Analytical Chemistry, p. 149-152	Bucur Raul Alin, Farkas Iuliana, Bucur Alexandra Ioana,	2016	0
4	<i>Improved quality factor in (K,Na)NbO<sub>3</sub> based environmental friendly piezoceramics,</i> Proceedings of the 22nd International Symposium on Analytical and Environmental Problems, University of Szeged, Department of Inorganic and Analytical Chemistry, p. 149-152	Iuliana Farkas, Alexandra Ioana Bucur, Raul Alin Bucur	2016	0
5	<i>Resveratrol as corrosion inhibitor for metals in wine and food industries</i>	Cristian George Vaszilcsin, Mircea Laurentiu Dan,	2016	0

		Delia-Andrada Duca, Mihaela Labosel		
6	<i>Inhibitory effect of resveratrol on aluminum corrosion in alcoholic solutions</i>	Cristian George Vasilcsin, Mircea Laurentiu Dan, Delia-Andrada Duca, Mihaela Labosel	2016	0
7	<i>Influence of titanium dioxide loading on activated carbon for advanced drinking water treatment,</i> TIM15-16 Physics Conference 27-28 May 2016, Timisoara, Romania, Book of Abstracts	Corina Orha, Cornelia Bandas, Carmen Lazau, Florica Manea	2016	0
8	<i>Composite materials based on activated carbon and carbon nanofiber for humic acid removal,</i> 22 <sup>nd</sup> International Symposium on Analytical and Environmental Problems, 10 October 2016, Szeged, Hungary	Corina Orha, Florica Manea, Carmen Lazau, Rodica Pode	2016	0
9	<i>OBTAINING AND CHARACTERIZATION OF Zn<sub>3</sub>V<sub>2</sub>O<sub>8</sub> and Mg<sub>3</sub>V<sub>2</sub>O<sub>8</sub> PSEUDO BINARY OXIDE NANOMATERIALS BY HIDROTHERMAL METHOD,-Poster-</i> -TIM 15-16 Physics Conference	Mihaela Birdeanu, Mirela Vaida, Daniel Ursu, Eugenia Fagadar-Cosma	2016	0
10	<i>Characterization of Mg(Ta<sub>1-x</sub>Nbx)O<sub>6</sub> obtained by the solid-state method, - Poster-</i> 22 <sup>nd</sup> International Symposium on Analytical and Environmental Problems	Mihaela Birdeanu, Mirela Vaida	2016	0
11	<i>Preliminary photocatalytic activity studies on WO<sub>3</sub> film</i> The 11th International Symposium of the Romanian Catalysis Society, RomCat 2016, Timisoara, 139-140	Florina Stefania Rus, Mirela Iorga, Andreas Herklotz, Stefan Novaconi, Radu Banica, Iuliana Sebarchievici (Popa), Cristina Mosoarca, Petrica Linul	2016	0
12	<i>Inducing phase transitions of T-like BiFeO<sub>3</sub> films by low-energy He implantation</i> APS March Meeting 2016, March 14–18, 2016; Baltimore, Maryland	Andreas Herklotz, Christianne Beekman, Stefania Florina Rus, Ilia Ivanov, Nina Balke, Thomas Zac Ward	2016	0
13	<i>Control of SnO<sub>2</sub> films by epitaxy and Helium implantation,</i> TIM15-16 Physics Conference American Institute of Physics Conference Proceedings Series (AIP-CP) indexed by the ISI Web of Knowledge.	Stefania Florina Rus, Andreas Herklotz	2016	0
14	<i>Obtaining and characterization of helium doped SNO<sub>2</sub> films,</i> Young Researcher's International Conference on Chemistry and	Stefania Florina Rus, Andreas Herklotz, Paula Svera, Doru Buzatu	2016	0

	Chemical Engineering (YRICCCE I), 12-14 May 2016, Cluj-Napoca, Romania			
15	<i>Electro-oxidation of ascorbic acid by Mn(III)porphyrin-silica hybrid film prepared by pulsed laser deposition,</i> TIM15-16 Physics Conference	Iuliana Sebarchievici, Eugenia Fagadar-Cosma, Bogdan-Ovidiu Taranu, Mihaela Birdeanu, Stefania Florina Rus, Ioan Taranu, Anca Lascu	2016	0
16	<i>Titanium dioxide thin films by pulsed laser deposition for sensing application,</i> TIM15-16 Physics Conference	Cornelia Bandas, Carmen Lazau, Corina Orha, Daniel Ursu , Stefania Rus , Ileana Cernica, Florica Manea	2016	0
17	<i>Obtaining of FeCO3 Microparticles,</i> Proceedings of the 22nd International Symposium on Analytical and Environmental Problems 10 oct. 2016, Publisher: University of Szeged, Department of Inorganic and Analytical Chemistry, H-6720 Szeged, Dóm tér 7, Hungary, ISBN 978-963-306-507-5 ,pp: 333-336.	Marius Chirita, Mihaela Luminita Kiss, Adrian Ieta	2016	0
18	<i>Comparative GC-MS and HPLC methods for monitoring of some pesticides residues in maize and wheat cultivated in Banat County,</i> Book of Abstracts, 3rd International Conference on Analytical Chemistry, Analytical Chemistry for a Better Life, RO-ICAC 2016, Iasi, 28-31 Aug, Romania, p.84.	Ştefănuț M.N., Dobrescu M., Vaszilcsin C., Căta A., Ienașcu I.M.C.	2016	0
19	<i>A GC-MS Method For Monitoring Of Some Pesticides Residues In Maize And Wheat Cultivated In Banat County,</i> Chimia 2016, "New Trends In Applied Chemistry", Book of Abstracts, May 26 – 28, 2016, Constanta, Romania	Adina E. Căta, Marius C. Dobrescu, Ioana M.C. Ienașcu, Cristian G. Vaszilcsin, Mariana N. Ştefănuț	2016	0
20	<i>In situ growth of TiO<sub>2</sub> nanorods thin film by hydrothermal method,</i> TIM 15-16 Physics Conference 26 - 28 May 2016, Timisoara, Romania	Daniel Ursu, Dabici Ana-Maria, Miclau Marinela	2016	0
	H <sub>2</sub> Tl <sub>2</sub> O <sub>5</sub> •H <sub>2</sub> O NANOWIRE AS AN INTERMEDIARY PHASE OF TIO <sub>2</sub> ANODE FOR DYE SENSITIZED SOLAR CELL, „23rd International Symposium on Analytical and Environmental Problems” din Szeged, Ungaria, în perioada 9-10 Octombrie 2017.	Daniel Ursu, Melinda Vajda, Dabici AnaMaria, Miclau Marinela	Lucrare stiintifica prezentata 2017	0
	A low cost photocatalytic processes that uses blue light, TIM 17 Physics Conference, Timisoara, Romania, 25-	Radu Banica, Petrica-Andrei Linul, Cristina Mosoarca.	Lucrare stiintifica prezentata	0

	27 Mai 2017.		2017	
	PdS/ZnS-CdS based photocatalysts for photochemical water splitting, TIM 17 Physics Conference, Timisoara, Romania, 25-27 Mai 2017.	Radu Banica, Petrica-Andrei Linul, Andrei Racu and Cristina Mosoarca.	Lucrare stiintifica prezentata 2017	0
	Microwave assisted hydrothermal synthesis of FeCO <sub>3</sub> , TIM 15-16 Physics Conference, Timisoara, Romania, 26-28 Mai 2016	Cristina Mosoarca, Radu Banica, Petrica-Andrei Linul, Paula Svera, Marius Chirita.	Lucrare stiintifica prezentata 2017	0
	"Novel (K,Na)NbO <sub>3</sub> based piezoelectric ceramic" 23 <sup>rd</sup> International Symposium on Analytical and Environmental Problems, 9 October 2017, Szeged, Hungary	Farkas Iuliana, Bucur Alexandra Ioana, Bucur Raul Alin	Lucrare stiintifica prezentata 2017	0
	"Phase transitions in lead free piezoelectric materials" 23 <sup>rd</sup> International Symposium on Analytical and Environmental Problems, 9 October 2017, Szeged, Hungary	Bucur Raul Alin, Farkas Iuliana, Bucur Alexandra Ioana	Lucrare stiintifica prezentata 2017	0
	Effect of carbon nanofiber onto TiO <sub>2</sub> -modified powder/granular activated carbon for advanced water treatment, 23 <sup>rd</sup> International Symposium on Analytical and Environmental Problems October 9-10, 2017, PROCEEDINGS OF THE 23rd International Symposium on Analytical and Environmental Problems October 9-10, 2017 University of Szeged, Department of Inorganic and Analytical Chemistry, ISBN 978-963-306-563-1, pg. 244-248	Corina Orha, Carmen Lazau, Florica Manea, Daniel Ursu	Lucrare stiintifica prezentata 2017	0
	Dimensional distribution of PM <sub>2.5</sub> and PM <sub>10</sub> in the road proximity, "23 <sup>rd</sup> International Symposium on Analytical and Environmental Problems", Szeged, Ungaria, comunicare științifică (poster).	Cristina Mosoarca, Radu Banica, Petrica Linul, Alexandra Ioana Bucur	Lucrare stiintifica prezentata 2017	0
	14 <sup>th</sup> International Conference on Nanosciences & Nanotechnologies (NN17) 4-7 July 2017, Thessaloniki, Greece	P. Sfirloaga, M. Poienar, I. Malaescu, A. Lungu, P. Vlazan	Lucrare stiintifica prezentata 2017	0
	Fourth International Conference CATALYSIS FOR RENEWABLE SOURCES: FUEL, ENERGY, CHEMICALS (CRS-4), ITALY	Paula Sfirloaga, Daniel Ursu, Bogdan Tararu, Maria Poienar, Anamaria Dabici, Paulina Vlazan	Lucrare stiintifica prezentata 2017	0
	23 rd International Symposium on Analytical and Environmental Problems Szeged, Hungary	P. Sfirloaga , B. Tararu , I. Malaescu , M. Poienar , C. N. Marin , P. Vlazan	Lucrare stiintifica prezentata 2017	0
	23 rd International Symposium on	P. Sfirloaga , C. Mosoarca,	Lucrare	0

	Analytical and Environmental Problems Szeged, Hungary	M. Poienar, P. Svera, C. Ianasi, P. Vlazan	stiintifica prezentata 2017	
	Control of SnO <sub>2</sub> films by epitaxy and Helium implantation Volume 1796, 4 January 2017, Article number 030008 TIM15-16 Physics Conference; Timisoara; Romania; Code 125866 IF 0	S. F. Rus si A. Herklotz	2017	0
	Obtaining and characterization of <i>p-n</i> inorganic junction using TiO <sub>2</sub> like <i>n</i> component 14 <sup>th</sup> International Conference on Nanosciences & Nanotechnologies (NN17) 4-7 July 2017, Thessaloniki	Carmen Lazau, Corina Orha, Cornelia Bandas, Daniel Ursu, Ileana Cernica	2017	0
	Thermal Stability of Anthocyanin-based Extract from Red Onion Skin, Proceedings of XIX YUCORR International Conference 2017, Tara Mountain, Serbia, 12-15 September 2017, p. 198-203.	Adina CĂTA, Mariana N. ŞTEFĂNUȚ M.N., Ioana M.C. IENAŞCU,	2017	0
	Antioxidant Capacity of Some New N-(2-bromophenyl)-2-hydroxy-benzamide Derivatives, The 6 <sup>th</sup> IEEE International Conference on E-Health and Bioengineering - EHB 2017, Sinaia, Romania, June 22-24, 2017 (they will be included in Conference Proc. Citation Index of Thomson Reuters (former ISI Proceedings)).	I.M.C. Ienaşcu, A. Căta, M.N. Ştefănuț	2017	0
	„Green” technology for obtaining biologically active compounds, Proceedings, XIX International Conference YuCorr 2017, Tara Mountain, Serbia, 12-15 September 2017, p. 190-197	Ioana M.C. Ienaşcu, Adina Căta, Mariana N. Ştefănuț, Iuliana M. Popescu	2017	0
	OPTICAL PROPERTIES OF SnO <sub>2</sub> FILM, 23 rd International Symposium on Analytical and Environmental Problems Szeged, Hungary	Stefania Florina Rus , Andreas Herklotz, Iuliana Sebarchievici, Mirela Iorga	2017	0
	MYRICETIN AS CORROSION INHIBITOR FOR METALS IN WINE INDUSTRY Conference: INTERNATIONAL U.A.B. – B.EN.A. CONFERENCE ENVIRONMENTAL ENGINEERING AND SUSTAINABLE DEVELOPMENT, At Alba Iulia, Romania, Volume: Book of Abstract	Cristian George VASZILCSIN, Mircea Laurentiu DAN, Delia Andrada DUCA, Mihaela Alexandra LABOSEL	2017	0
	STAINLESS STEEL CORROSION IN ETHANOL SOLUTIONS IN THE PRESENCE OF SULFITE IONS-A	Mihaela Alexandra LABOSEL, Cristian George VASZILCSIN, Mircea	2017	0

	PERMANENT PROBLEM IN THE WINE INDUSTRY  Conference: " New trends and strategies in the chemistry of advanced materials with relevance in biological systems, technique and environmental protection " 9 th Edition,, At Timisoara, Romania, Volume: Book of Abstract	Laurentiu DAN, Delia Andrada DUCA		
	International U.A.B. – B.EN.A Conference, Environmental Engineering and Sustainable Development 6 <sup>th</sup> Ed., Alba Iulia, Romania, May 25-27, 2017	Ştefanuț M.N., Dobrescu M., Vaszilcsin C., Căta A., Fitigău F., Ienașcu I.M.C.	2017	-
	23 <sup>rd</sup> International Symposium on Analytical and Environmental Problems, 9-10 October 2017, Szeged, Hungary	M. Ştefanuț, M. Dobrescu, F. Fitigău, A. Căta, I.M.C. Ienașcu	2017	-
	Obtaining of 3D nanostructured $\alpha$ -Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> /Ag nanosheets ensembles, AIP Conf. Proc. 1796, doi: 10.1063/1.497237070, pp: 030005-1, 030005-6, 2017	Marius Chirita, Mihaela Luminita Kiss, Radu Banica, Adrian Ieta	2017	-
	Obtaining Iron Oxides by Fe II-Na4EDTA Hidrotermal Decomposition, Publisher: University of Szeged, Department of Inorganic and Analytical Chemistry, acceptat la publicare, in redactare.	Marius Chirita, Liviu Mocanu	2017	-
	Single Crystalline Micrometric Iron Oxide with Superparamagnetic Behavior for Biomedical Applications, The Academic Days of Arad", 18-20 Mai 2017, Arad, Romania	Marius Chirita, Mihaela Luminita Kiss, Corina Ana Beljung	2017	-
	The Twelfth Conference for Young Scientists in Ceramics – 2017, Precursor influence on photocatalytic performance of CdxE1-xS compounds	P. Svera, C. Ianasi, O. Verdes, M. Suba, A. Andelescu, D. Ursu, M. Miclau	2017	-
	A 16-a ediție a Seminarului Național de Nanoștiință și Nanotehnologie, București, România ( <a href="http://www.romnet.net/nano/SNN2017/prezentari%20oraleO/PASCARIU_SNN_2017_final.pdf">http://www.romnet.net/nano/SNN2017/prezentari%20oraleO/PASCARIU_SNN_2017_final.pdf</a> )	A. V. Racu, M.-C. Pascariu, M. Niculescu	2017	-
	Arad Academic Days, the 27th Edition, , Arad, România ( <a href="http://www.zileleacademicearadene.ro/">http://www.zileleacademicearadene.ro/</a> )	A.V. Racu, I. Sebarchievici, M.C. Pascariu, M. Niculescu	2017	-
	Arad Academic Days, the 27th Edition, , Arad, România ( <a href="http://www.zileleacademicearadene.ro/">http://www.zileleacademicearadene.ro/</a> )	M. Niculescu, M.C. Pascariu, A.V. Racu	2017	-

	Arad Academic Days, the 27th Edition, , Arad, România ( <a href="http://www.zileleacademicearadene.ro/">http://www.zileleacademicearadene.ro/</a> )	M.C. Pascariu, A.V. Racu, I.R. Ciopănoiu, M. Pleșa, A.X. Lupea, M. Niculescu	2017	-
--	---	--	------	---

**4.2.3. Lucrări publicate în alte publicații relevante:**

Nr.	Titlul articolului	Numele Jurnalului, Volumul, Pagina nr.	Nume Autor	Anul publicării
1	Obtaining of 3D Nanostructured $\alpha$ -Fe <sub>2</sub> O <sub>3</sub> /Ag Nanosheets Ensembles	AIP Conference Proceedings, paginile nealocate inca	Marius Chirita, Mihaela Luminita Kiss, Radu Banica and Adrian Ieta	2017
2	Bondonic Effects on the Topo-Reactivity of PAHs	<i>ADVANCES IN CHEMICAL MODELING. VOLUME 6</i> Mihai V. Putz (Ed.) NOVA Science Publishers, Inc., New York, USA ISBN: 978-1-63485-030-8 Chapter 1; pp. 3-38	Putz M.V., Tudoran M.A.	2016
3	Anti-Bondonic Effects on the Topo-Reactivity of PAHs	<i>ADVANCES IN CHEMICAL MODELING. VOLUME 6</i> Mihai V. Putz (Ed.) NOVA Science Publishers, Inc., New York, USA ISBN: 978-1-63485-030-8 Chapter 2; pp. 39-70	Putz M.V., Tudoran M.A.	2016
	TiO <sub>2</sub> -modified zeolite-carbon nanotubes composite electrode for photoelectrodegradation of pentachlorophenol from water under UV irradiation,	WIT Transactions on Ecology and the Environment, Volume 216, pg. 133-142, ISSN 1746-448X (on-line), doi:10.2495/WS170191	Agnes Jakab, Rodica Pode, Aniela Pop, Joop Schoonman, Corina Orha, Florica Manea,	2017
	Effect of TiO <sub>2</sub> loading on powder-activated carbon in advanced drinking-water treatment	WIT Transactions on Ecology and the Environment, Volume 216, pg.203-211, ISSN 1746-448X (on-line), doi:10.2495/WS170191	Corina Orha, Carmen Lazau, Daniel Ursu, Florica Manea	2017
	Dimensional distribution of PM <sub>2.5</sub> and PM <sub>10</sub> in the road proximity	Proceedings of the 23 <sup>rd</sup> International Symposium on Analytical and Environmental Problems, pag. 253-256, ISBN 978-963-306-563-1	Cristina Mosoarca, Radu Banica, Petrica Linul, Alexandra Ioana Bucur	2017
	Stainless steel corrosion in ethanol solutions in the presence of sulfite ions-a permanent problem in the wine	Conference: "New trends and strategies in the chemistry of advanced materials with relevance in biological systems, technique and environmental protection " 9	Mihaela Alexandra LABOSEL, Cristian George VASZILCSIN, Mircea Laurentiu DAN, Delia Andraida DUCA	2017

	industry	th Edition,, At Timisoara, Romania, Volume: Book of Abstract		
	Obtaining of 3D nanostructured $\alpha$ -Fe2O3/Ag nanosheets ensembles	AIP (American Institute of Physics)	Marius Chirita, Mihaela Luminita Kiss, Radu Banica, Adrian Ieta	2017
	Obtaining Iron Oxides by Fe II-Na4EDTA Hidrotermal Decomposition	Publisher: University of Szeged, Department of Inorganic and Analytical Chemistry, acceptat la publicare, in redactare.	Marius Chirita, Liviu Mocanu	2017
	Spectroscopic and semiempirical quantum chemical study of copper(ii) phthalocyaninate	23 <sup>rd</sup> International Symposium on Analytical and Environmental Problems", Szeged, Ungaria, 9-10 Octombrie 2017	Andrei Racu, Mihai-Cosmin Pascariu, Zoltán Szabadai, Mircea Mracec	2017

**4.2.4. Studii, Rapoarte, Documente de fundamentare sau monitorizare care:**

**a) au stat la baza unor politici sau decizii publice:**

Tip document	Nr.total	Publicat în:
Hotărâre de Guvern	-	-
Lege	-	-
Ordin ministrului	-	-
Decizie președinte	-	-
Standard	-	-
Altele (se vor preciza)	-	-

**b) au contribuit la promovarea științei și tehnologiei - evenimente de mediatizare a științei și tehnologiei:**

Tip eveniment	Nr. apariții	Nume eveniment:
web-site	-	-
Emisiuni TV	-	-
Emisiuni radio	-	-
Presă scrisă/electronică	-	-
Cărți	-	-
Reviste	-	-
Bloguri	-	-
Altele (se vor preciza)	-	-

**4.3. Tehnologii, procedee, produse informaticice, rețele, formule, metode și altele asemenea:**

Tip	Nr. Total	2016	2017
Tehnologii		-	1
Procedee		2	6
Produse informaticice		-	-
Rețele		-	-

Formule		-	-
Metode		5	15
Altele asemenea ( <i>se vor specifica</i> )		-	-

Din care:

**4.3.1 Propunerি de brevete de inventie, certificate de înregistrare a desenelor și modelelor industriale și altele asemenea:**

	Nr.propunerি brevete	Anul înregistrării	Autorul/Autorii	Numele propunerii de brevet
OSIM	A/00342/2016	2016	Birdeanu Mihaela Ionela	1. Procedeu cu consum redus de energie pentru obtinerea oxidului pseudobinar MgNb <sub>2</sub> O <sub>6</sub> folosind metoda hidrotermală la 250 oC pentru inhibarea coroziunii otelurilor
	A10004/2017	2017	Banica Radu, Linul Petrica, Racu Andrei, Svera Paula, Mosoarca Cristina, Pascariu Cosmin	1. Procedeu de sinteza a fotocatalizatorilor activi în vizibil de tip PdS/ZnS-CdS care utilizează ZnS precrystalizată hidrotermal.
EPO	-	-	-	-
USPTO	-	-	-	-

**4.4. Structura de personal:**

Personal CD (Nr.)	2016	2017
Total personal	80	78
Total personal CD	70	61
cu studii superioare	68	61
cu doctorat	41	38
doctoranzi	11	11

**4.5. Infrastructuri de cercetare rezultate din derularea programului-nucleu. Obiecte fizice și produse realizate în cadrul derulării programului; colecții și baze de date conținând înregistrări analogice sau digitale, izvoare istorice, eșantioane, specimene, fotografii, observații, roci, fosile și altele asemenea, împreună cu informațiile necesare arhivării, regăsirii și precizării contextului în care au fost obținute:**

Nr.	Nume infrastructură/obiect/bază de date...	Data achiziției	Valoarea achiziției (lei)	Sursa finanțării	Valoarea finanțării infrastructurii din bugetul Progr. Nucleu	Nr. Ore-om de utilizare a infrastructurii pentru Programul-nucleu
1.	-	-	-	-	-	-
2.						

**5. Rezultatele Programului-nucleu au fundamentat alte lucrări de cercetare:**

	Nr.	Tip
Proiecte internaționale	1	<i>COST Action Proposal OC-2017-1-22156 "NETWORK ON 1DIMENSIONAL NANOSTRUCTURES OF INORGANIC COMPOUNDS FOR TECHNOLOGICAL APPLICATIONS" to the COST Open Call OC-2017-1.</i>
Proiecte naționale		
	1	<i>Proiect PD (PN-III-DCD-RU-PD-2016-1)</i>
	1	<i>PN-III-P2-2.1-PED-2016</i>
	1	<i>Proiect experimental Demonstrativ</i>
	1	<i>Proiecte de cercetare pentru stimularea tinerelor echipe independente</i>
	1	<i>PN-III-P1-1.1-MC-2017-0791, PD-2016</i>

**6. Rezultate transferate în vederea aplicării :**

Tip rezultat	Instituția beneficiară (nume instituție)	Efecte socio-economice la utilizator
<i>Ex. tehnologie, studiu</i>	<i>nume IMM/institutie</i>	

**7. Alte rezultate: .... (a se specifica, dacă este cazul).**

**8. Aprecieri asupra derulării programului și propuneri:**

Programul NUCLEU – *Tehnologii, materiale și produse sustenabile / TEMAPS* al INCEMC Timisoara s-a derulat în condiții optime, nivelul finanțării / proiect fiind adecvat.

În cadrul prezentului Program Nucleu – *Tehnologii, materiale și produse sustenabile / TEMAPS*, INCEMC-Timisoara, în urma analizei posibilităților privind dotarea și diversitatea resurselor umane de care dispune, precum și a experienței acumulate de-a lungul timpului, și-a stabilit următoarele obiective prioritare:

- **Obiectiv 1. ENERGIE**
- **Obiectiv 2. MEDIU**
- **Obiectiv 3. MATERIALE, PROCESE SI PRODUSE INOVATIVE**

Programul reflectă Strategia INCEMC pe perioada 2015 – 2020 și își propune optimizarea și integrarea pe verticală a cercetării științifice și aplicării tehnologice, în sensul satisfacerii ciclului de cercetare-dezvoltare-inovare: (nano)materiale inteligente/sustenabile (materie condensată, electrochimie aplicată, senzori) ⇒ sisteme foto-electro-chimice sustenabile/energie durabilă (baterii, celule solare îmbunătățite, deopotrivă în principiu structural cât și în cel integrat/funcțional/design, etc.). Aceste direcții se regăsesc printre direcțiile prioritare atât la nivel european (PC 7), cât și la nivel național (PN 3).

Pe parcursul desfășurării Programului nucleu s-a urmărit:

- Ridicarea performanțelor științifice și de inovare;
- Dezvoltarea resurselor umane ale institutului;
- Creșterea vizibilității naționale și internaționale;
- Creșterea potențialului de CDI prin:
  - formarea profesională continuă și asigurarea unei cariere în cercetare;
  - dezvoltarea instituțională.
- Dezvoltarea parteneriatelor CDI cu institute și universități;
- Îmbunătățirea cooperării între institut și industrie, mai ales prin dezvoltarea de parteneriate public private;
- Asigurarea competitivității economice a beneficiarilor;
- Conștientizarea societății privind importanța CDI în sectorul industrial pentru asigurarea unor beneficii economico-sociale pentru societate.

Se poate considera că Programul Nucleu s-a desfășurat în bune condiții, dovedindu-se a fi un mijloc foarte eficient de promovare a unor tematici noi, de interes major.

Activitatea științifică desfășurată în cadrul obiectivelor 1, 2 și 3 a avut ca rezultate:

- studiul bibliografic al bateriilor solare reincarcabile obținute prin integrarea unor celule solare sensibilizate cu colorant (DSSCs) de tip  $n$  și a unei baterii cu electrolit apoi pe baza de Li și Na;
- proiecte de tehnologii de laborator pentru obținerea de nanotuburi și nanobare de  $TiO_2$ , cat și a materialelor cu structura stratificată de tipul  $A(Li, Na)B(Co, Cr, Mn)O_2$ ;
- nanotuburi și nanobare de  $TiO_2$ , cat și materiale cu structura stratificată de tipul  $A(Li, Na)B(Co, Cr, Mn)O_2$ ;
- tehnologia hidrotermală de obținere a nanotuburilor și nanobarelor de  $TiO_2$ , cat și a materialelor cu structura stratificată de tipul  $A(Li, Na)B(Co, Cr, Mn)O_2$ ;
- sintetizarea materialelor  $FeCO_3$ ,  $Fe_3O_4$  și  $Fe_2O_3$  prin metoda hidrotermală asistată de microunde și respectiv prin descompunerea termică în mediu controlat;
- caracterizarea materialelor obținute prin tehnici ca: microscopie electronică de transmisie, spectroscopie de raze X dispersivă în energie, difracție de raze X, microscopie electronică cu scanare, spectrometrie Raman, spectrometrie UV-VIZ de reflectanță difuză, spectrometrie FTIR, termogravimetrie, analiza termică diferențială și porozimetrie;
- înglobarea nanoparticulelor magnetice sintetizate în polimetacrilat de metil și obținerea de filme subțiri având grosimea mai redusă de 10 micrometri care se pot prezenta ca suport ieftin pentru încarcare cu fotocatalizator;
- actualizarea datelor bibliografice cu privire la obținerea materialelor piezoelectrice flexibile „prietenoase” mediului;
- prezentarea și descrierea metodelor de caracterizare ale materialelor piezoelectrice flexibile;
- descrierea modelului electric de convertire a energiei mecanice în energie electrică, utilizând piezoelemente flexibile;

- studiu bibliografic al bateriilor solare reincarcabile obtinute prin integrarea unor celule solare sensibilizate cu colorant (DSSCs) de tip  $n$  si a unei baterii cu electrolit apos pe baza de Li si Na;
- proiecte de tehnologii de laborator pentru obtinerea de nanotuburi si nanobare de  $TiO_2$ , cat si a materialelor cu structura stratificata de tipul A(Li, Na)B(Co,Cr,Mn)O<sub>2</sub>;
- nanotuburi si nanobare de  $TiO_2$ , cat si a materialelor cu structura stratificata de tipul A(Li, Na)B(Co,Cr,Mn)O<sub>2</sub>;
- tehnologia hidrotermala de obtinere a nanotuburilor si nanobarelor de  $TiO_2$ , cat si a materialelor cu structura stratificata de tipul A(Li, Na)B(Co,Cr,Mn)O<sub>2</sub>;
- sinteza si caracterizarea fotocatalizatorilor de tip PdS/CdS/ZnS;
- fabricarea suporturilor hibride magnetice de tip polimer/particulă anorganică pentru suportarea fotocatalizatorilor calcogenici activi în vizibil;
- suportarea fotocatalizatorilor pe suporturi cu proprietati magnetice;
- experimente de fotocataliza utilizand sulfuri binare suportate si nesuportate;
- realizarea unui setup experimental compus din sursa monocromatica de lumina, corp al fotoreactorului si benzi polimerice incarcate cu fotocatalizator;
- metode de laborator optimizate pentru obtinerea materialelor piezoelectrice fara plumb, pe baza de Niobat de Sodiu si Potasiu modificat cu perovskiti de tipul GdB<sub>1-x</sub>Sm<sub>x</sub>BO<sub>3</sub> si SmBO<sub>3</sub> (B=Co, Mn, Cr, Fe, Al), utilizati la fabricarea piezoelementelor flexibile;
- identificare si discutii asupra tranzitiilor de faza cristalina observate in cazul doparilor studiate
- determinarea parametrilor celulei elementare pentru materialele studiate.
- demonstrarea posibilitatii de utilizare a resveratrolului ca inhibitor de coroziune;
- obtinerea unor date referitoare la vitezele de coroziune ale otelului carbon si a otelului inoxidabil in solutii sintetice in prezenta si in absenta resveratrolului;
- sinteza materialelor hibride pe baza de carbune activ si nano-dioxid de titan nedopat si dopat cu ioni de argint (Ag) prin metode conventionale (sol-gel, hidrotermal clasic) si neconventionale (hidrotermal in camp de microunde);
- analiza morfologica si elementală a materialelor obtinute prin microscopie electronica de baleaj;
- testarea materialelor hibride selectate in urma caracterizarii acestora, in procesele de adsorbtie si fotocataliza pentru indepartarea materiei organice de tipul acizilor humici din apa;
- evaluarea comparativa a eficientei fotocatalitice si de adsorbtie a unor materiale hibride pe baza de carbune activ pulbere si sub forma granulata, functionalizat cu particule de  $TiO_2$  aplicate in procesul de degradare a acidului humic;
- obtinerea materialelor nanostructurate de tip oxizi pseudo-binari  $Mgx(Ta_{1-y}Nb_y)_{2Ow}$  unde  $x=1, 3; y=0, 0.33, 0.1, 0.05, 1; y=0, 0.33, 0.1, 0.05, 1; w=6, 8$  cu proprietati anticorozive utilizand metoda din stare solida si metoda hidrotermala;
- realizarea filmelor subțiri monostrat si a filmelor subțiri nanostructurate de tip sandwich folosind nanomateriale de tip  $Mgx(Ta_{1-y}Nb_y)_{2Ow}$  unde  $x=1, 3; y=0, 0.33, 0.1, 0.05, 1; y=0, 0.33, 0.1, 0.05, 1; w=6, 8$  obtinute prin metoda hidrotermala si metoda din stare solida;
- obtinerea filmelor subtiri prin doua metode: PLD si drop-casting;
- elaborarea unui studiu asupra tehnicilor de depunere a filmelor subtiri oxidice cu diverse aplicatii, precum si a proprietatilor materialelor de depus;
- studiul aplicatiilor filmelor ce urmeaza a fi depuse prin tehnica PLD;
- studiu de literatură referitor la situatia actuală a metodelor de extractie si analiză a reziduurilor de pesticide din cereale și alimente;
- studiu de documentare stiintifica referitor la lucrările in domeniu si evolutia inregistrată in stiinta si industrie
- urmarind avantajele economice si de crestere a performantelor mecanice (putere marita si consum redus), pentru a intelege mai bine mecanismul de functionare al sistemului;

- studiul variantelor constructive si avantajele/dezavantajele diferitelor tipuri de electrolizor folosite pentru obtinerea hidrogenului, pentru a alege varianta optima de proiectare si constructie a modelului experimental;
- realizarea de calcule DFT preliminare utilizand un pachet soft CRYSTAL14, precum si operatii de standardizare a celulei elementare a unor compusi delafositici de tip  $\text{ABO}_2$  ( $\text{FeCuO}_2$ ,  $\text{GaCuO}_2$ ,  $\text{CrCuO}_2$ );
- calcularea structurilor de benzi energetice, densitatea de stari electronice pe fiecare atom al retelelor cristaline, densitatile de sarcina electronice;
- reducerea vitezei de coroziune a oțelurilor utilizate in procesele de vinificatie;
- reducerea conținutului de metale grele în vinuri și a impactului asupra mediului și a sănătății oamenilor.
- obtinerea si caracterizarea unor noi materiale hibride „low cost” cu proprietati avansate de adsorbție/ fotocataliza;
- dezvoltarea unui nou concept de tratare avansata a apei pentru potabilizare;
- noi materiale care pot folosite cu succes in procesele de adsorbție si fotocataliza pentru indepartarea compusilor organici de tipul acizilor humici din apa;
- demonstrarea viabilitatii efectului dioxidului de titan in prezenta luminii UV asupra suprafetei carbunelui activ pulbere asigurand activitatea de autocuratare, facandu-l astfel potrivit pentru tratarea avansata a apei potabile in timpul proceselor de fotocataliza;
- realizarea prin sinteza din stare solida si sinteza prin metoda hidrotermala in anumite condiții de noi nanomateriale cu structura oxidica pseudo-binara de tip  $\text{Mg}_x(\text{Ta}_{1-y-z}\text{Nb}_y)_2\text{O}_w$  unde  $x=1, 3; y=0, 0.33, 0.1, 0.05, 1; z=0, 0.33, 0.1, 0.05, 1; w=6, 8;$
- obtinerea filmelor subtiri de tip monostrat si / sau sandwich;
- testarea filmelor subtiri ca inhibitori de coroziune in mediu salin sau acid;
- demonstrarea protectiei anticorozive in cazul tuturor electrozilor modificati prin depuneri de filme subtiri;
- demonstrarea faptului că tensiunea din filmele subtiri de  $\text{SnO}_2$  de diferite grosimi, poate fi o modalitate eficientă de a stabili diferențele care apar în valoarea benzii interzise a acestora;
- demonstrarea faptului că deformatia este o modalitate eficientă de a controla deplasarea de bandă a filmelor de  $\text{SnO}_2$  și sugerează că ingineria deformatiei este o cale atrăgătoare pentru a controla proprietățile optice ale semiconducitorilor de oxid;
- obtinerea filmelor subtiri oxidice epitaxiale - de o importanță extraordinară datorită aplicabilitatii promițătoare a acestora într-o gamă largă de domenii tehnologice, incluzând cele optice, electronice, optoelectronice și biologice;
- studiul și determinarea concentrațiilor unor erbicide și insecticide prin diverse metode în câteva cereale cultivate în Banat: grâu, porumb, rapiță;
- studiul patentelor de inventii si a diverselor lucrari experimentale din mediul academic si non-academic si a lucrarilor care urmaresc avantajele economice si de crestere a performantelor mecanice (putere marita si consum redus), pentru a intelege mai bine mecanismul de functionare al sistemului;
- studiul variantelor constructive si a avantajelor/dezavantajelor diferitelor tipuri de electrolizor folosite pentru obtinerea hidrogenului, pentru a alege varianta optima de proiectare si constructie a modelului experimental;
- finalizarea fazei de concept, proiectare, detaliere si achizitia unor componente necesare pentru constructia si montajul instalatiei experimentale;
- realizarea unui studiu bibliografic cuprinzător și relevant pentru identificarea celor mai nocivi poluanți din zonele urbane caracterizate de trafic intens ;
- determinarea condițiilor experimentale optime pentru identificarea densității volumetrice a particulelor (PM) existente într-o zonă urbană caracterizată de trafic intens ;

- ilustrarea unei harti 3D a poluanților identificați, cu ajutorul programelor software specifice prelucrării datelor de acest tip;
- elaborarea unui studiu amanuntit referitor la epurarea apelor uzate prin electrocoagulare folosind electrozi de aluminiu;
- proiectarea sistemului de electrocoagulare pentru epurarea apelor uzate;
- contributii la dezvoltarea unui Laborator de Chimie-Fizica Structurala și Computationala;
- editarea material didactic de initiere în tehnici de analiza quanto-chimica prin utilizarea softului CRYSTAL 14 pentru calcule *ab initio*;
- realizarea calculelor pentru o serie de proprietăți de material, pentru structuri delafositice  $\text{FeCuO}_2/\text{GaCuO}_2/\text{CrCuO}_2$  precum și  $\text{ZnS}/\text{CdS}$ ;
- analiza grafenei cu defecte topologice, precum și a precursorilor ei organici, ca sursă de puncte cuantice (quantum-dots, QD) dinamice;
- clarificarea și re-formularea următoarelor concepte fundamentale din chimie-fizică: conceptul de "spațiu al proprietăților chimice" se aplică deopotrivă unor serii de molecule de polietilenamină lineare și ramificate, în stare naturală și după docare (precursori de nanosisteme cu carbon) ca și la nano-interacții pe sisteme de carbon jucșapuse; aromaticitatea corelează cu gradul de izomerism pentru o serie de hidrocarburi policiclice aromatice; efectul de acumulare topologică a golurilor apare în rețelele de tip "fagure de miere" pe supercelule de grafen;
- prezenta abordare bondonică/bondotică a punctelor cuantice (bi-puncte cuantice/quantum double dots, QDD sau  $\text{QD}_2=\mathcal{D}$ ) la nivelul sistemelor fotovoltaice sustenabile cu grafene se realizează prin modelarea și controlul bi-punctelor cuantice în celule Schottky cu bistrat de grafene;
- realizarea de pelicule subtiri epitaxiale de  $\text{SnO}_2$  și  $\text{WO}_3$  prin tehnica ablatiei laser;
- doparea peliculei subtiri cu ioni de heliu pentru ameliorarea caracteristicilor de material;
- caracterizarea fizico chimica și morfologica a structurilor obținute;
- actualizarea studiilor bibliografice prin realizarea unei baze de date referitoare la metodele de obtinere a filmelor subtiri de  $\text{TiO}_2$ , precum și metode de depunere in-situ a oxidului de wolfram direct din precursori pe suprafața filmelor subtiri de  $\text{TiO}_2$  în vederea dezvoltării unor filme subtiri multi-strat de tipul  $\text{TiO}_2/\text{WO}_3$ ;
- sintetizarea materialelor perovskitice de tipul  $\text{ABO}_3$  prin diferite metode: metoda sol-gel, metoda coprecipitarii, urmate de tratamente termice la diferite temperaturi și diferiti tempi de calcinare; caracterizarea materialelor obținute;
- studiul stabilității termice a antocianinelor: cianidin-3-glucozida (Cy-3-Glu) și malvidin-3-glucozida (Mv-3-Glu) și realizarea unor teste de degradare accelerată;
- obținerea și caracterizarea microparticulelor de carbonat de fier cu structura monocristalina și cu dimensiuni controlate: actualizarea bazei de date, caracterizarea XRD, EDAX și SEM a particulelor de carbonat de fier obținute, stabilirea limitelor de temperatură și timp între care este favorizată cristalizarea carbonatului de fier prin cercetarea efectuată asupra descompunerii complexului  $\text{FeNa}_4\text{EDTA}$  în prezența ureei;
- obținerea de magnetita mezocrystalina prin tratamentul termic controlat al monocristalelor de carbonat de fier și caracterizarea acesteia prin: difracție de raze X (caracterizarea structurii cristaline), microscopie electronică cu scanare, TEM (caracterizarea morfologică), analiza EDAX (analiza EDAX), VSM, SQUID, histeresigraf (caracterizarea magnetică), studierea ordinii magnetice prin spectrometrie Mosbauer;
- obținerea prin iradierea în camp de microunde a 6 compuși: 1 amida, N-(2-bromo-fenil)-2-hidroxi-benzamida, menționată în literatura de specialitate, 2 esteri, unul etilic, [2-(2-bromo-fenilcarbamoyl)-fenoxi]-acetatul de etil și unul metilic, [2-(2-bromo-fenilcarbamoyl)-fenoxi]-acetat de metil, compuși noi, o hidrazida, N-(2-bromo-fenil)-2-hidrazinocarbonilmetoxi-benzamida, precum și 2 hidrazone 2-(5-bromo-2-hidroxi-benziliden-hidrazinocarbonilmetoxi)-N-(2-bromo-fenil)-benzamida și N-(2-bromo-fenil)-2-(4-dimetilamino-benziliden-hidrazinocarbonilmetoxi)-benzamida;

- caracterizarea completă a compușilor sintetizați prin analizarea prin metode moderne de analiză, IR, RMN, analiza elementala;
- clarificarea și re-formularea următoarelor concepte fundamentale din chimie-fizică:
  - conceptul de "spațiu carbon-activ" pentru structurile bazate pe nanostructuri extinse de carbon, proiectate topologic și caracterizate prin energia de activare corelată cu indicii topologici energetic de tip Wiener;
  - conceptul de "cinetică moleculară foto-activată", cu analiza oferită de mașinile moleculare, pe baza componentelor structurale, rotaxani și catenane, și a combinațiilor complexe ale acestora în navete moleculare, sau cicluri moleculare cu rol în conversia energiei sau în transportul de sarcină, de informație chimică (activarea reactivității și cataliză cotrolată), etc.;
  - posibilitatea de a evidenția existența bondonului prin acțiune la distanță, viy; reactivitatea indusă la distanță, prin "unda bondonică" în spațiul carbonului activ; fie prin cuplare-decuplare electronică, la nivelul femtosecundelor, în regimul timpului de viață al bondonilor, sub foto-control; posibilitatea de a cupla cele două concepte de mai sus prin depozitarea-depunerea-sinteză directă a mașinilor moleculare pe nano-suprafețe extinse de carbon deschide posibilitatea unor "circuite integrate" nano-moleculare, cu mare potențial aplicativ;
- dezvoltarea de noi materiale necesare în diverse aplicații precum în protecția mediului, ca și în energetica solară;
- controlarea proprietăților filmelor epitaxiale obținute prin tehnica ablației laser, prin modificarea parametrilor de depunere, utilizând o metodă revoluționară ce conduce la obținerea de filme epitaxiale cu proprietăți performante;
- studiu asupra obținerii de filme subțiri epitaxiale cu proprietăți controlabile, asupra aplicabilității filmelor subțiri cu proprietăți superioare obținute prin diferite metode, precum și asupra determinării și investigării ai parametrilor necesari obținerii de filme subțiri cu proprietăți avansate;
- obținerea filmelor subțiri epitaxiale cu grosimea mai mică de 30 nm cu structură și cristalinitate orientată;
- doparea structurii astfel obținute cu ioni de heliu pentru a obține o structură cu proprietăți superioare a fost efectuată;
- caracterizarea fizico chimică a filmelor obținute prin metoda nouă de implantare de ioni de heliu;
- sinteze de laborator pentru obținere de filme subțiri de  $TiO_2$  pe substraturi diferite prin metode avansate;
- caracterizarea structurală și morfologică a filme subțiri de  $TiO_2$  obținute;
- realizarea metodologiilor optimizate pentru obținerea filmelor subțiri de  $TiO_2$  prin metodele propuse, filme subțiri de  $TiO_2$  nedopat;
- obținerea materialelor pervoskitice multifunctionale prin metode conventionale: tehnologia ceramica și metoda sol-gel urmată de tratament termic la diferite temperaturi și prin metode alternative: metoda ultrasonica cu sonotroda imersată în mediul de reacție și metoda hidrotermală asistată în camp de microunde (de la fotocataliză la conversie de energie);
- studiul proprietăților morfo-structurale ale materialelor obținute;
- studiul posibilității îmbunătățirii stabilității antocianinelor la tratament termic prin adiția unor cofactori atât în probe de antocianine pure cât și în extracte naturale de antocianine;
- testarea compușilor sintetici (quercitină, acid citric) și a extractelor de plante (rozmarin, cimbru) cu caracter oxidant puternic;
- evaluarea procesului de degradare prin aplicarea unui model de cinetică de ordinul 1 și calculul parametrilor cinetici;
- îmbunătățirea activității antioxidantă a antocinelor pure cât și a extractelor naturale de antocianine prin adiția cofactorilor;

- demonstrarea posibilității obținerii de cristale de maghemită poroasă, de dimensiuni submilimetrice, romboedrice cu suprafață specifică mare ( $40,14 \text{ m}^2 / \text{g}$ ) de obicei asociată cu cristalite de dimensiuni nanometrice;
- posibilitatea utilizării cristalelor de maghemită poroasă datorită dimensiunilor mari ( $150 \mu\text{m}$ ) și a cristalinitatii înalte într-o arie largă de aplicații, în special ca suporturi magnetice, senzori de gaz și electrozi pentru baterii de Li-ion; dimensiunile cristalelor sunt suficient de mari și rezistente la acțiunile mecanice, și permit atașarea unui contact electric;
- evaluarea celor 6 compusi sintetizati într-o fază anteroară (2016), facand parte din clasa salicilaniidei, esteri, hidrazide, hidrazone, prin trei metode chimice, DPPH, ABTS, FRAP, și una electrochimica, voltametria ciclica și determinarea activitatii antioxidantie a acestora;
- includerea compusilor [2-(2-bromo-fenilcarbamoyl)-fenoxi]-acetatul de etil (ester etilic), N-(2-bromo-fenil)-2-hidrazinocarbonilmethoxy-benzamida (hidrazida), 2-(5-bromo-2-hidroxi-benziliden-hidrazinocarbonilmethoxy)-N-(2-bromo-fenil)-benzamida (hidrazone) în β-ciclodextrina, pentru a le imbunătăti solubilitatea în apa (biodisponibilitatea) și eficiența moleculelor de medicament incluse, în organismele vii;
- caracterizarea complexelor obținute, în fază lichida și solidă, prin spectroscopie IR, RMN, spectrofotometrie UV-VIS, difracție RX, SEM ;
- construirea și validarea a noi senzori care pot fi utilizati la scanarea urinei și sangelui pentru detectia precoce a leucemiei;
- obținerea de materiale luminescente, doparea lor cu ioni ai lantanidelor;
- caracterizarea fizico-chimică a acestor materiale;
- înglobarea pulberilor în polimeri transparenti;
- identificarea unui material eficient, candidat pentru fabricarea a unui concentrator solar luminescent eficient realizat prin înglobarea nano pulberilor în PMMA și obținerea emisiei luminoase la iluminare cu lumina UV și albastră;
- extracția compușilor organici bioactivi cu sulf din plante ce aparțin florei autohtone;
- studiu complex de literatură care a arătat posibilitatile de extractie, de analiza și de utilizare a compușilor organici bioactivi cu sulf;
- studiu asupra noțiunilor generale despre porfirine și derivații porfirinici;
- importanța studiului fenomenelor de agregare ale porfirinelor;
- prezentarea unor studii în care aggregatele porfirinice au fost caracterizate folosind diferite metode de investigare;
- studiu de literatură referitor la utilitatea materialelor photocatalitice selectate pentru cercetare cat și a potentialul lor photocatalitic;
- stabilirea celei mai adecvate metode de obținere a materialelor photocatalitice preconizate și analiza lor prin diferite metode fizico-chimice;
- demonstrarea prin GC a influenței suprafatei specifice asupra photocatalizatorilor;
- noi proiecte de cercetare dezvoltare în cadrul planului național sau programe ale UE, pe baza rezultatelor științifice obținute;
- participare la rețele de cercetare interne și internaționale;
- publicarea unor lucrări în reviste de specialitate din țară și din străinătate.

In cadrul proiectelor finanțate au fost obținute o serie de rezultate valoroase care confirmă necesitatea derulării în continuare și finalizării acestora pentru a se crea posibilitatea dezvoltării de cercetări aplicative sau de frontieră în vederea inițierii de noi proiecte de cercetare în cadrul programelor naționale și internaționale.

Astfel, rezultatele obținute în urma cercetărilor efectuate în cadrul prezentului Program Nucleu – **Tehnologii, materiale și produse sustenabile** – s-au concretizat prin publicarea și comunicarea de lucrări științifice.

- problematica abordată a fost diversă, din domeniile energiei regenerabile, sănătății, mediului, ingineriei, biologiei;
- în cadrul tuturor proiectelor au fost elaborate baze de date conținând studii de specialitate care au scos în evidență importanța tematicilor abordate;
- s-au realizat instalații și componente ale acestora pentru aplicații la sinteza unor materiale nanostruturate;
- s-a participat la 18 manifestări științifice (congrese internaționale, simpozioane, seminarii, conferințe) din domeniu, cu un număr de 50 de lucrări științifice;
- au fost publicate în reviste cu referenți de specialitate un număr de 15 lucrări științifice în străinătate;
- au fost înregistrate 2 cereri de brevet;
- au fost publicate 5 capitole de carte la o editură din străinătate;
- s-au constituit colective de lucru mixte, specializate pe diverse domenii științifice.

Totodată, rezultatele obținute au stat și vor sta la baza elaborării unor proiecte de cercetare în cadrul Planului Național sau a programelor internaționale.

Consideram că Programul Nucleu este un mijloc util de a stimula creația științifică și de a da posibilitatea cercetătorilor, mai ales celor tineri, de a accede la fonduri de cercetare pentru a pune în valoare potențialul de care dispun.

Obiectivele specifice fiecărei teme din cadrul Programului Nucleu au fost îndeplinite la termenele prevăzute și în bugetul aprobat, nivelul științific al acestora fiind corespunzător cerințelor.

Proiectele abordate în cadrul prezentului Program Nucleu – **Tehnologii, materiale și produse sustenabile** – sunt dezvoltate în concordanță cu direcțiile de cercetare prevăzute în strategia INCEMC.

Având în vedere aceste rezultate, propunem abordarea în 2018 a unor noi proiecte de cercetare în domeniul Programului Nucleu, astfel încât să poată fi realizate lucrări cu reale posibilități de dezvoltare a unor noi aplicații în cadrul unor proiecte naționale și internaționale, lucrări științifice, brevete de invenție, participări la târguri și expoziții, colaborări naționale și internaționale.

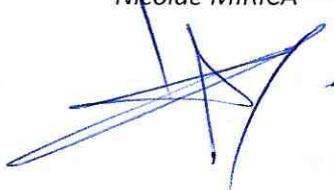
DIRECTOR GENERAL,

Nicolae MIRICA



DIRECTOR DE PROGRAM,

Nicolae MIRICA



DIRECTOR ECONOMIC,

Simona DRĂGHICIU

