

RAPORT ANUAL DE ACTIVITATE
privind desfășurarea programului nucleu
Tehnologii nepoluante si inovative pentru sanatate, protectia mediului si eficienta
energetica, TINSME, PN 19 22
anul 2020

Durata programului: 4 ani

Data începerii: 14.02.2019

Data finalizării: 10.12.2022

1. Scopul programului:

Scopul Programului Nucleu **Tehnologii nepoluante și inovative pentru sănătate, protecția mediului și eficiență energetică/TINSME** îl reprezintă elaborarea de tehnologii inovative orientate spre domenii ca protecția mediului/tehnologii curate, energii regenerabile/creșterea eficienței energetice și sănătate/creșterea calitatii vietii.

Obiectivele prezentului program nucleu se încadrează în **Strategia INCEMC pentru 2019-2022** și **Planul Multianual de Dezvoltare al INCEMC pe 2019-2022**, fiind în concordanță cu **SNCDI 2014-2020** și contribuind astfel la creșterea competitivității economiei românești prin inovare și la creșterea contribuției românești la progresul cunoașterii de frontieră.

Activitățile desfășurate continuă, aprofundează, dar și deschid noi oportunități ale cercetărilor realizate anterior privind sistemele foto-electrochimice sustenabile, realizarea unor senzori specifici pentru creșterea calitatii vietii – protecția mediului, dar și cu aplicabilitate în medicină și sănătate.

Rezultatele obținute în urma derulării prezentului program nucleu vor reprezenta baza atât pentru viitoare mari proiecte aplicative cu care INCEMC va participa la competiții naționale sau europene, cât și pentru accesarea de contracte directe cu beneficiari din industrie sau servicii.

Cercetări foarte actuale la nivel mondial asupra grafenelor și a utilizării lor în aplicații energetice au fost inițiate de INCEMC în colaborare cu parteneri din Germania și Italia și vor fi orientate spre fundamentarea teoretică a proceselor, de fapt a unei științe noi – grafentronica – domeniu care se anunță a fi revoluționar și va contribui la creșterea contribuției românești la progresul cunoașterii de frontieră.

Obiectivele temelor propuse în cadrul programului **converg** către **indeplinirea obiectivului general** al Programului Nucleu propus “Tehnologii nepoluante și inovative pentru sănătate, protecția mediului și eficiența energetică / TINSME” propus de INCEMC – respectiv elaborarea de tehnologii inovative orientate spre domenii ca protecția mediului/tehnologii curate, energii regenerabile/creșterea eficienței energetice și sănătate/creșterea calitatii vietii.

Acest Plan Nucleu continuă, extinde și valorifică atât cercetările desfășurate în cadrul departamentelor INCEMC și a proiectelor castigate prin alte competiții – PN III, PN II, POC, POSCCE, cât și rezultatele obținute alături de instituțiile partenere – UPT, UVT, IMT, ICER, INFIN etc., asigurându-se astfel **complementaritatea** prezentului program nucleu cu acestea.

Obiectivele Planului Nucleu propus **corespund** cu strategia de evoluție a INCEMC în domeniul electrochimiei și materiei condensate așa cum reiese din codul de activitate principală CAEN 7219 și codurile secundare (www.incemc.ro), obiective cuprinse în Strategia INCEMC pentru 2019-2022 și Planul Multianual de Dezvoltare al INCEMC pe 2019-2022.

Programul Nucleu propus este parte a SNCDI 2014-2020, fiind orientat spre atingerea obiectivului de creștere a competitivității economiei românești prin cercetare, dezvoltare și inovare, a creșterii contribuției românești la progresul cunoașterii de frontieră și va implica INCEMC în activitatea de elaborare a strategiilor de dezvoltare a domeniului economic și social pe linie de electrochimie și materie condensată.

2. Modul de derulare al programului:

2.1. Descrierea activităților (utilizând și informațiile din rapoartele de fază, Anexa nr. 10)

Obiectivul PN 19 22 01. *Energii regenerabile și eficiență energetică* are în vedere studiul unor aspecte privind: realizarea unor eșantioane de nanofire de argint, obținere imagini SEM, spectre EDX; realizarea unor eșantioane de aerogeluri metalice/hibride metal-polimer; efectuarea măsurătorilor de compresiune - rezistența electrică pentru materialele hibride obținute; avansarea (pentru prima dată după cunoștințele noastre) unui criteriu eminent cuantic, la nivelul frontierei HOMO vs. LUMO de ordine superioare pentru evaluarea unui nanomotor molecular activat de lumină; analiza cazului de lucru al unui nanomotor pe bază de rotaxan „în 4 timpi” ca test paradigmatic: pentru acesta se identifică nivelurile structurale cuantice pentru a fi implicate în mod adecvat în condițiile de reactivitate chimică integrată (funcționalizare cu grafen sau precursori ai acestuia în fazele ulterioare ale proiectului); avansarea unui mecanism original pentru orbitalii moleculari (MO) de frontieră interioară (cel mai scăzut neocupat/LU și cel mai ridicat ocupat/HO), i.e., $LUMO > HOMO$ vs. $HOMO(i) > HOMO(i + 1)$ vs. $LUMO(j) < LUMO(j+1)$, pentru intra-conversia electronică în cazul sistemelor mașinilor moleculare (MM), aplicate aici pe un rotaxan cu mișcări de translație a inelului funcțional; studiul aplicativ al structurii de lucru a sistemului MM de tipul [2]rotaxanului $1H^{3+}$; analiza cadrului structural al unei mașini moleculare foto-electro-activate, care pentru comutarea determinată de lumină a inelului R între cele două stații A_1 și A_2 funcționează după un mecanism intramolecular; studiul observabilei cuantice, cu accent asupra mecanismului mașinii moleculare foto-electroactivate, prin așa-numita *ipoteză cuantică de nano-funcționare* (legată de evoluția sa cuantică liberă); proiectarea, construcția, testarea și eficientizarea dispozitivelor de generare de energie electrică; optimizarea filmelor de oxid de fier pe placute de fier ca și fotoanod al celulelor solare sensibilizate cu colorant organic de tip n (DSSC); proiectarea, construcția, testarea și eficientizarea dispozitivelor de generare de energie electrică.

Dezvoltarea acestor direcții conduce la rezolvarea și finalizarea următoarelor tematici:

- realizarea unor eșantioane de nanofire de argint, obținere imagini SEM, spectre EDX;
- realizarea unor eșantioane de aerogeluri metalice/hibride metal-polimer;
- efectuarea măsurătorilor de compresiune - rezistența electrică pentru materialele hibride obținute;
- avansarea (pentru prima dată după cunoștințele noastre) unui criteriu eminent cuantic, la nivelul frontierei HOMO vs. LUMO de ordine superioare pentru evaluarea unui nanomotor molecular activat de lumină;
- analiza cazului de lucru al unui nanomotor pe bază de rotaxan „în 4 timpi” ca test paradigmatic: pentru acesta se identifică nivelurile structurale cuantice pentru a fi implicate în mod adecvat în condițiile de reactivitate chimică integrată (funcționalizare cu grafen sau precursori ai acestuia în fazele ulterioare ale proiectului).
- avansarea unui mecanism original pentru orbitalii moleculari (MO) de frontieră interioară (cel mai scăzut neocupat/LU și cel mai ridicat ocupat/HO), i.e., $LUMO > HOMO$ vs. $HOMO(i) > HOMO(i + 1)$ vs. $LUMO(j) < LUMO(j+1)$, pentru intra-conversia electronică în cazul sistemelor mașinilor moleculare (MM), aplicate aici pe un rotaxan cu mișcări de translație a inelului funcțional;
- studiul aplicativ al structurii de lucru a sistemului MM de tipul [2]rotaxanului $1H^{3+}$ (cu componentele: macrociclul eter dibenzo[24]coroană-8 (DB24C8) combinat cu o componentă tip ganteră ce conține un centru de amoniu secundar ($-NH_2^+$) și o unitate 4,4'-bipiridină (bpy^{2+}), având ca opritori o grupare funcțională de antracen la unul dintre capete și o grupare 3,5-di-terț-butilfenil la celălalt capăt);
- analiza cadrului structural al mașinii moleculare foto-electro-activate, care pentru comutarea determinată de lumină a inelului R între cele două stații A_1 și A_2 funcționează după un mecanism intramolecular; structura rotaxanului constă din: un macrociclu bis-*p*-fenilen-34-coroană-10 donor de electroni (R – inelul); un component în formă de ganteră (care conține două centre de recunoaștere acceptoare de electroni pentru inel): o unitate 4,4'-bipiridină (A_1^{2+}) și o unitate 3,3'-dimetil-4,4'-bipiridină (A_2^{2+}), care joacă rolul „stațiilor” pentru inel; un fotosenzitivator tip $[Ru(bpy)_3]^{2+}$ (bpy, 2,2'-bipiridină) la transferul de electroni (P^{2+}) capabil să opereze cu lumină vizibilă și care acționează ca un opritor; un distanțator rigid tip *p*-terfenil (S) – menține fotosenzitivatorul la distanță de unitățile acceptoare de electroni; o grupare tetraarilmetan (T) – ca al doilea opritor;

- studiul actual al observabilei cuantice, focusat asupra mecanismului mașinii moleculare foto-electroactivate, prin așa-numita *ipoteză cuantică de nano-funcționare* (legată de evoluția sa cuantică liberă) și care, totuși, ar putea și ar trebui să funcționeze și ca și criteriu pentru un nanomotor fotoactivat-autonom;
- proiectarea, construcția, testarea și eficientizarea dispozitivelor de generare de energie electrică;
- optimizarea filmelor de oxid de fier pe placute de fier ca și fotoanod al celulelor solare sensibilizate cu colorant organic de tip n (DSSC);
- proiectarea, construcția, testarea și eficientizarea dispozitivelor de generare de energie electrică;
- proiectarea, construcția, testarea și eficientizarea celulelor solare sensibilizate cu colorant (DSSC-uri) pe baza oxizilor de wolfram folosind coloranți și electroliti organici;
- hidrogenarea oxidului de cupru (I) în vederea îmbunătățirii performanței celulei solare de tip-p DSSC;
- proiectarea și realizarea de materiale cu nivelul energetic superior al bandei de valență cât mai pozitiv pe baza de oxizi de cupru pentru celule solare sensibilizate cu colorant;
- proiectarea, construcția, testarea și eficientizarea celulelor solare perovskitice pe baza de oxizi pe baza de cupru (CuO/Cu₂O) și oxizi de fier (Fe₂O₃) sau oxid de titan (TiO₂);
- proiectarea, construcția, testarea și eficientizarea unui generator piezoelectric de energie electrică.
- 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;
- participare cu lucrări științifice la manifestări interne și internaționale;
- publicarea unor lucrări în reviste de specialitate din țară și din străinătate.

În cadrul acestui obiectiv, în anul 2020, au fost abordate următoarele proiecte:

- **PN 19 22 01 01. Tehnologii avansate pentru materiale dedicate sectoarelor energetice.** Acesta a avut în componența lui etapa:

- Structuri tridimensionale microporoase metalice

În etapa derulată în anul 2020 s-au realizat următoarele activități:

- Sinteza nanostructurilor de argint și a spumelor flexibile impregnate cu nanoparticule de argint.
- Sinteza aerogelurilor pe baza de argint.
- Efectuarea măsurătorilor de compresiune - rezistența electrică pentru materiale hibride.

- **PN 19 22 01 02. Grafenronică cu electrochimie cuantică de spin.** Acesta a avut în componența lui etapele:
 - Mașini Moleculare cu Grafen Fotoactivat. Stocarea de Speța a II a a Energiei Mașinilor Moleculare Grafenice
 - Mașini Moleculare cu Grafen Fotoactivat. Reactivitatea electrochimică cu mașini moleculare de spin - partial

În etapele derulate în anul 2020 s-au realizat următoarele activități:

- Prezenta fază de lucru avansează, pentru prima dată după cunoștințele noastre, un criteriu eminent cuantic, la nivelul frontierei HOMO vs. LUMO de ordine superioare pentru evaluarea unui nanomotor molecular activat de lumină. Cazul de lucru al unui nanomotor pe bază de rotaxan „în 4 timpi” este luat ca un test paradigmatic: pentru acesta se identifică nivelurile structurale cuantice pentru a fi implicate în mod adecvat în condițiile de reactivitate chimică integrată (funcționalizare cu grafen sau precursori ai acestuia în fazele ulterioare ale proiectului).
- Se avansează un mecanism original pentru orbitalii moleculari (MO) de frontieră interiori (cel mai scăzut neocupat/LU și cel mai ridicat ocupat/HO), i.e., LUMO > HOMO vs. HOMO(i) > HOMO(i + 1) vs. LUMO(j) < LUMO(j+1), pentru intra-conversia electronică în cazul sistemelor mașinilor moleculare (MM), aplicate aici pe un rotaxan cu mișcări de translație a inelului funcțional;
- În mod aplicat se studiază structura de lucru a sistemului MM de tipul [2]rotaxanului 1H³⁺, cu componentele: macrociclul eter dibenzo[24]coroană-8 (DB24C8) este combinat cu un component tip ganteră care conține un centru de amoniu secundar (-NH₂⁺) și o unitate 4,4'-bipiridină (bpy²⁺), și are ca opritori o grupare funcțională de antracen la unul dintre capete și o grupare 3,5-di-terț-butilfenil la celălalt capăt.
- Analiza cadrului structural al mașinii moleculare foto-electro-activate, care pentru comutarea determinată de lumină a inelului R între cele două stații A₁ și A₂ funcționează după un mecanism

intramolecular; structura rotaxanului constă din: un macrociclu bis-*p*-fenilen-34-coroană-10 donor de electroni (R – inelul); un component în formă de ganteră (care conține două centre de recunoaștere acceptoare de electroni pentru inel): o unitate 4,4'-bipiridină (A_1^{2+}) și o unitate 3,3'-dimetil-4,4'-bipiridină (A_2^{2+}), care joacă rolul "stațiilor" pentru inel; un fotosenzitivator tip $[Ru(bpy)_3]^{2+}$ (bpy, 2,2'-bipiridină) la transferul de electroni (P^{2+}) capabil să opereze cu lumină vizibilă și care acționează ca un opritor; un distanțator rigid tip *p*-terfenil (S) – menține fotosenzitivatorul la distanță de unitățile acceptoare de electroni; o grupare tetraarilmetan (T) – ca al doilea opritor;

- Studiul actual al observabilei cuantice, focusat asupra mekansimului mașinii moleculare foto-electroactivate, prin așa-numita *ipoteză cuantică de nano-funcționare* (legată de evoluția sa cuantică liberă) și care, totuși, ar putea și ar trebui să funcționeze și ca și criteriu pentru un nanomotor fotoactivat-autonom.

➤ **PN 19 22 01 03. Tehnologii inovative de obtinere de dispozitive integrate de generare si stocare de energie electrica.** Acesta a avut în componența lui etapele:

- Proiectarea, constructia, testarea si eficientizarea dispozitivelor de generare de energie electrica - partial
- Proiectarea, constructia, testarea si eficientizarea dispozitivelor de generare de energie electrica - final

În etapele derulate în anul 2020 s-au realizat următoarele activități:

- Obținerea prin metoda hidrotermala si caracterizarea filmelor de oxid de fier pe placuta metalica de fier;
- Construirea si caracterizarea celulelor solare sensibilizate cu colorant (DSSC-uri) pe baza oxizilor de fier folosind coloranti si electroliti organici.
- Proiectarea, constructia, testarea si eficientizarea celulelor solare sensibilizate cu colorant (DSSC-uri) folosind coloranti si electroliti organici.
 - Proiectarea, constructia, testarea si eficientizarea celulelor solare sensibilizate cu colorant (DSSC-uri) pe baza oxizilor de wolfram folosind coloranti si electroliti organici.
 - Hidrogenarea oxidului de cupru (I) in vederea imbunatatirii performantei celulei solare de tip-p DSSC.
 - Proiectarea si realizarea de materiale cu nivelul energetic superior al bandei de valenta cat mai pozitiv pe baza de oxizi de cupru pentru celule solare sensibilizate cu colorant.
- Proiectarea, constructia, testarea si eficientizarea celulelor solare perovskitice pe baza de oxizi pe baza de cupru (CuO/Cu_2O) si oxizi de fier (Fe_2O_3) sau oxid de titan (TiO_2)
- Proiectarea, constructia, testarea si eficientizarea unui generator piezoelectric de energie electrica.

Obiectivul PN 19 22 02. Protecția mediului și tehnologii curate are în vedere studiul unor aspecte privind: electrozii modificați cu materiale perovskitice de tipul manganit de lantan, dopate cu diferite concentrații de azot; influența concentrației dopantului din structura perovskitică asupra comportamentului capacitiv al electrozilor, cat și comportamentul electrochimic al acestora în prezență fericianurii de potasiu; calculul suprafețelor electroactive și a coeficienților de difuzie pentru toți electrozii modificați cu compuși perovskitici prin cele 4 proceduri de depunere; identificarea electrozilor modificați cu perovskiti cu cele mai bune proprietăți electrocatalitice pentru reacția de degajare a oxigenului, de reducere a hidrogenului, respectiv de oxidare a azotitului.

Dezvoltarea acestor direcții conduce la rezolvarea și finalizarea următoarelor tematici:

- realizarea electrozilor modificați cu materiale perovskitice de tipul manganit de lantan, dopate cu diferite concentrații de azot;
- studiul influenței concentrației dopantului din structura perovskitică asupra comportamentului capacitiv al electrozilor, cat și comportamentul electrochimic al acestora în prezență fericianurii de potasiu.
- calculul suprafețelor electroactive și a coeficienților de difuzie pentru toți electrozii modificați cu compuși perovskitici prin cele 4 proceduri de depunere.

- analiza celor trei studii electrochimice descrise în raport de fază și identificarea electrozilor modificați cu perovskiți care au cele mai bune proprietăți electrocatalitice pentru reacția de degajare a oxigenului, de reducere a hidrogenului, respectiv de oxidare a azotitului;
- studiul proprietăților electrocatalitice pentru reacția de reducere a oxigenului ale electrozilor modificați cu perovskiți,
- stabilirea în urma rezultatelor preliminare a celui mai performant electrod, și anume electrodul din grafit modificat prin depunerea din suspensie în etanol a unei compoziții din LaMnO_3 dopat cu 0,1% Ag și carbon conductiv.
- 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; participare cu lucrări științifice la manifestări interne și internaționale; publicarea unor lucrări în reviste de specialitate din țară și din străinătate.

În cadrul acestui obiectiv, în anul 2020, a fost abordat următorul proiect:

➤ **PN 19 22 02 01. Nanotehnologii inovative pentru obtinerea de materiale hibride avasate cu aplicatii in protectia mediului.** Acesta a avut în componența lui etapele:

- Caracterizarea morfo-structurala materialelor obtinute. Realizarea de electrozi modificati cu materiale perovskitice - final
- Testarea activitatii electrocatalitice a electrozilor pe baza de compusi perovskitici

În etapele derulate în anul 2020 s-au realizat următoarele activități:

- Modificarea electrozilor cu compușii perovskitici;
- Caracterizarea electrochimică a electrozilor modificați cu compuși perovskitici: Măsurători de capacitanță electrochimică pentru electrozii modificați cu filme perovskitice;
- Comportamentul electrochimic în prezența speciei redox $\text{K}_3\text{Fe}(\text{CN})_6$. Studiul cineticii de transfer de sarcină la electrozii modificați cu compuși perovskitici
- Investigarea activității electrocatalitice a electrozilor modificați cu perovskiți pentru reacția de degajare a oxigenului;
- Investigarea activității electrocatalitice a electrozilor modificați cu perovskiți pentru reacția de reducere a oxigenului;
- Investigarea activității electrocatalitice a electrozilor modificați cu perovskiți pentru reacția de oxidare a azotitului.

Obiectivul PN 19 22 03. Sănătate și calitatea vieții are în vedere studiul unor aspecte privind: realizarea extracțiilor de compuși naturali activi din legume, fructe și flori prin ultrasonare și în câmp cu microunde; sinteze chimice de obținere a unor compuși pe baza de salicilanilide; caracterizarea compușilor bioactivi naturali și sintetici prin tehnici moderne de analiză; caracterizarea produselor obținute prin metode moderne de analiză: FT-IR, HPLC și metode clasice (spectre ^1H -RMN și ^{13}C -RMN, UV-Vis, determinări de total fenoli, activități antioxidante, etc.).

Dezvoltarea acestor direcții conduce la rezolvarea și finalizarea următoarelor tematici:

- perfecționarea extracțiilor de compuși naturali activi din legume, fructe și flori prin ultrasonare și în câmp cu microunde;
- sinteze chimice de obținere a unor compuși pe baza de salicilanilide;
- caracterizarea compușilor bioactivi naturali și sintetici prin tehnici moderne de analiză.
- produsele obținute au fost caracterizate prin metode moderne de analiză: FT-IR, HPLC și metode clasice (spectre ^1H -RMN și ^{13}C -RMN, UV-Vis, determinări de total fenoli, activități antioxidante, etc.).
- 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;
- participare cu lucrări științifice la manifestări interne și internaționale;
- publicarea unor lucrări în reviste de specialitate din țară și din străinătate.

În cadrul acestui obiectiv, în anul 2020, a fost abordat următorul proiect:

➤ **PN 19 22 03 01. Complecși de incluziune supramoleculară a unor compuși naturali și de sinteză cu aplicații în sănătate.** Acesta a avut în componența lui etapa:

- Caracterizarea compusilor bioactivi naturali și sintetici prin tehnici moderne de analiza

În etapa derulată în anul 2020 s-au realizat următoarele activități:

- Caracterizarea extractelor de compuși naturali din matrici autohtone prin diverse metode: determinarea activităților antioxidante, metodele DPPH și FRAP;
- Determinarea conținutului total de fenoli- metoda Folin-Ciocalteu;
- Separarea și identificarea glucosinolaților și antocianinelor, cu ajutorul standardelor interne, prin HPLC;
- Caracterizarea compuşilor de sinteză prin spectrele ¹H-RMN și ¹³C-RMN, spectre FT-IR, puncte de topire (structuri sintetice confirmate prin analize spectrale).

Obiectivul PN 19 22 04. Tehnologii avansate (electrochimice / chimice / nanotehnologii) are în vedere studiul unor aspecte privind: realizarea prin fotolitografie a imaginii unui electrod interdigital; realizarea utilizând metoda „spin coating” a substratului fotosensibil; studiul influenței timpului de expunere, numărului de straturi fotosensibile depuse, a turatiei cu care este depus fotorezistorul, respectiv diluției fotorezistorului utilizat; proiectarea și realizarea aparaturii de laborator ce permite formarea imaginii folosind iluminarea Kohler.

Dezvoltarea acestor direcții conduce la rezolvarea și finalizarea următoarelor tematici:

- realizarea cu succes a fotolitografierii unor electrozi interdigitali de Au prin metoda fotorezistorului negativ;
- obtinerea peliculelor de substanța fotosensibilă pe substratul dorit, utilizând tehnica „spin coating”;
- imaginea electrozilor interdigitali a fost obținută utilizând imaginea în negativ a obiectului dorit a fi fotolitografiat, respectiv metoda „wet etching” de realizare a imaginii în pozitiv pe substratul dorit a fost studiată influența diluției materialului fotosensibil asupra calității imaginii obținute;
- studiul influenței turatiei la care s-a efectuat depunerea prin „spin coating”;
- studiul influența numărului de straturi de substanța fotosensibilă depusă;
- studiul influența timpului de expunere asupra rezoluției imaginii obținute;
- realizarea dispozitivului experimental ce permite formarea imaginii folosind iluminarea Kohler.
- 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;
- participare cu lucrări științifice la manifestări interne și internaționale;
- publicarea unor lucrări în reviste de specialitate din țară și din străinătate.

În cadrul acestui obiectiv, în anul 2020, a fost abordat următorul proiect:

➤ **PN 19 22 04 01. Noi tehnologii aplicate în dezvoltarea unor dispozitive de tip senzor pentru monitorizarea mediului.** Acesta a avut în componența lui etapa:

- Proiectarea și construirea unui SUAS cu substrat piezoelectric pe baza de ceramica piezoelectrică

În etapele derulate în anul 2020 s-au realizat următoarele activități:

- Realizarea prin fotolitografie a imaginii unui electrod interdigital;
- Realizarea substratului fotosensibil utilizând metoda „spin coating”;
- Studiul influenței timpului de expunere, numărului de straturi fotosensibile depuse, a turatiei cu care este depus fotorezistorul, respectiv diluției fotorezistorului utilizat;
- Proiectarea și realizarea aparaturii de laborator ce permite formarea imaginii folosind iluminarea Kohler.

2.2. Proiecte contractate:

Cod obiectiv	Nr. proiecte contractate	Nr. proiecte finalizate	Anul 2020
1. PN 19 22 01	3	-	3
2. PN 19 02 02	1	-	1
3. PN 19 22 03	2	-	1

4. PN 19 02 04	1	-	1
Total:	7	-	6

2.3 Situația centralizată a cheltuielilor privind programul-nucleu : Cheltuieli în lei

	Anul 2020
I. Cheltuieli directe	3.331,046
1. Cheltuieli de personal	3.250.653
2. Cheltuieli materiale și servicii	82.102
II. Cheltuieli Indirecte: Regia	1.498.968
III. Achiziții / Dotări independente din care:	590
1. pentru construcție/modernizare infrastructura	0
TOTAL (I+II+III)	4.832.313

3. Analiza stadiului de atingere a obiectivelor programului

Activitățile de cercetare din cadrul Programului Nucleu **PN 19 22 TEHNOLOGII NEPOLUANTE ȘI INOVATIVE PENTRU SĂNĂTATE, PROTECȚIA MEDIULUI ȘI EFICIENȚĂ ENERGETICĂ/TINSME**, prevăzute pentru anul 2020, au fost îndeplinite.

În continuare sunt prezentate principalele cercetări realizate, concretizate în rapoarte de cercetare, în conformitate cu propunerile inițiale, corespunzătoare obiectivului propus.

OBIECTIVUL PN 19 22 01. ENERGII REGENERABILE ȘI EFICIENȚĂ ENERGETICĂ

- Sinteza nanostructurilor de argint și a spumelor flexibile impregnate cu nanoparticule de argint;
- Sinteza aerogelurilor pe baza de argint;
- Efectuarea măsurătorilor de compresie - rezistența electrică pentru materiale hibride;
- Studiul sistemelor de mașini moleculare până la cel de-al 6-lea grad (!) al spectrelor tuturor compușilor implicați în proces, prin rezultatele pentru orbitalii moleculari cei mai înalți ocupați și cei mai de jos neocupați, HOMO (1) - HOMO (6) și, respectiv, LUMO (1) - LUMO (6);
- Cel mai interesant rezultat, deși nu direct observabil, și oricum nu în prima parte din ciclul global al mașinii moleculare, se referă la ciclul cuantic structural studiat al HOMO/LUMO-urilor interioare (în profunzime, intra-moleculare) implicate în tranziția electronică;
- Studiul prezent regăsește cu succes "cercul închis" al orbitalilor legați acoperind și explicând astfel mașina moleculară studiată (cu spectrele și orbitalii HOMO/LUMO 3D implicați), "cercul închis al orbitalilor" urmărește îndeaproape energiile libere Gibbs observate experimental, verificând încrucișat fiabilitatea în raport cu evenimentele cuantice observabile (spectre ale compușilor);
- Analiza cuantică a mașinii moleculare a revelat faptul că abordarea modernă HSAB care implică HOMO și LUMO de frontieră (implicând nivelurile "0" ale spectrului fundamental-excitat) poate fi extinsă la așa-numitele HOMO/LUMO intra-trans orbitalice (implicând orbitali de frontieră HOMO mai scăzuți și LUMO mai ridicați) pentru a explica, la nivel structural cuantic, mecanismul complex intra- și trans-electronic al conversiei compușilor macro-ciclului în interiorul ciclului mașinii moleculare;
- Modelul cuantic chimic actual este capabil să identifice mecanismul complex teoretic-structural corect la nivel intra-/trans-molecular asigurând schimbul exact de energie zero (pierdere vs. câștig energetic) pe un ciclu complet al mașinii moleculare, așa cum se poate verifica imediat în cazul datelor prezentate, conectat la orbitalii moleculari de frontieră selectați în cazul rotaxanilor chimici implicați în mașina moleculară de lucru;
- Prezentul model cuantic a fost în continuare verificat/aplicat la mecanismul foto-activat, iar valorile energiilor orbitalilor HOMO, LUMO au fost calculate prin metoda semiempirică (ZINDO/1) (Algoritm gradient conjugat Polak-Ribiere și optimizare geometrie într-un singur punct) din Hyperchem 7.01;
- Obținere celule solare sensibilizate cu colorant (DSSC-uri) pe baza de oxizi de fier crescuți hidrotermal direct de placuta metalică de fier, folosind coloranți și electroliți organici., după cum urmează:

- celulele solare sensibilizate cu colorant (DSSC-uri) pe baza de Fe_2O_3 crescut crescut „in situ” hidrotermal direct pe placuta metalica de fier cu PVP in solutia hidrotermala;
 - celulele solare sensibilizate cu colorant (DSSC-uri) pe baza de Fe_3O_4 crescut crescut „in situ” hidrotermal direct pe placuta metalica de fier cu EC in solutia hidrotermala;
 - optimizarea parametrilor de sinteza a filmelor de oxid de fier in functie de eficienta DSSC-urilor;
 - optimizarea celulelor solare de tip n DSSC prin alegerea colorantului si electrolitului optim;
 - identificarea problemelor tehnologice ce limiteaza inca eficienta celulelor solare, urmand a fi rezolvate in continuarea etapei a treia.
- Obținere celule solare (sensibilizate cu colorant-DSSC si perovskitice) si generatoare piezoelectrice au fost obtinute, dupa cum urmeaza:
- Celulele solare sensibilizate cu colorant (DSSC-uri) pe baza de oxid de wolfram crescut „in situ” hidrotermal sau termic in atmosfera controlata oxidativa direct pe placuta metalica de wolfram;
 - S-a demonstrat efectul benefic al hidrogenului suplimentar asupra oxizilor de cupru, prin promovarea ancorarii colorantului (chemisorbtia puternica a gruparilor de ancorare -COOH pe substratul semiconductor), ducand astfel la o îmbunătățire cu 98% a curentului de scurt-circuit JSC și, implicit, la îmbunătățirea eficienței de conversie a energiei solare a DSSC de tip-p;
 - Pe baza valorii ridicate a fototensiunii estimate (2.10 V), materialul pe baza de $\text{Cu}_2\text{O}/\text{CuO}$ apare ca fiind cea mai bună alegere in proiectarea fotocatozilor extrem de eficienți în DSSC de tip-tandem. Implementarea și testarea acestuia este insa condiționata de proiectarea și sintetiza a noi coloranți organici ca sensibilizatori pentru DSSC de tip-p, caracterizati prin niveluri de energie HOMO mai mari de 1.605 V față de NHE;
 - Celulele solare perovskitice pe baza de oxizi pe baza de cupru ($\text{CuO}/\text{Cu}_2\text{O}$) si oxizi de fier (Fe_2O_3) sau oxid de titan (TiO_2);
 - Valorile curentului mici pentru toate seriile de filme se datoreaza faptului ca, prepararea si depunerea materialului de perovskite de tipul $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ trebuie sa fie efectiv in mediu inert. De aceea este absolut necesar achizitionarea unui glovebox unde sa se poata efectua prepararea si depunerea materialului perovskite in diferite medii inerte. Interactiunea cu aerul duce la o oxidare a materialului si implicit la o scadere a puterii de absorbtie a fotonilor;
 - Generatoare piezoelectrice pe baza de placute piezoelectrice flexibile pe baza de $(\text{K}_{0.5}\text{Na}_{0.5})_{1-x}\text{Li}_x\text{NbO}_3$ ($x=0.065$) dopat cu 1 mol% SCr, SFe, GCo, GMn au fost obtinute utilizind un substrat flexibil de policlorura de vinil expandata avind rolul de strat suport. Optimizarea celulelor solare de tip n DSSC prin alegerea colorantului si electrolitului optim.

OBIECTIVUL PN 19 22 02. PROTECȚIA MEDIULUI ȘI TEHNOLOGII CURATE

- Electrozi modificați cu materiale perovskitice de tipul manganit de lantan, dopate cu diferite concentrații de azot.
- Studiul influenței concentrației dopantului din structura perovskitică asupra comportamentului capacitiv al electrozilor, cat și a comportamentul electrochimic al acestora în prezență fericianurii de potasiu.
- Calculul suprafețelor electroactive și a coeficienților de difuzie pentru toți electrozii modificați cu compuși perovskitici prin cele 4 proceduri de depunere.
- Cele trei studii electrochimice au dus la identificarea electrozilor modificați cu perovskiti care au cele mai bune proprietăți electrocatalitice pentru reacția de degajare a oxigenului, de reducere a hidrogenului, respectiv de oxidare a azotului.
- Stabilirea celui mai performant electrod – din studiul proprietăților electrocatalitice pentru reacția de reducere a oxigenului ale electrozilor modificați cu perovskiti, rezultatele preliminare au indicat că electrodul din grafit modificat prin depunerea din suspensie în etanol a unei compoziții din LaMnO_3 dopat cu 0,1% Ag și carbon conductiv este cel mai performant.

OBIECTIVUL PN 19 22 03. SĂNĂTATE ȘI CALITATEA VIEȚII

- Caracterizarea extractelor de compuși naturali din matrici autohtone prin diverse metode: determinarea activităților antioxidante, metodele DPPH și FRAP;
- Determinarea conținutului total de fenoli- metoda Folin-Ciocalteu;
- Separarea și identificarea glucosinolaților și antocianinelor, cu ajutorul standardelor interne, prin HPLC;

- Caracterizarea compușilor de sinteză prin spectrele ^1H -RMN și ^{13}C -RMN, spectre FT-IR, puncte de topire (structuri sintetice confirmate prin analize spectrale).

OBIECTIVUL PN 19 22 04. TEHNOLOGII AVANSATE (ELECTROCHIMICE / CHIMICE / NANOTEHNOLOGII)

- Realizarea prin fotolitografie a imaginii unui electrod interdigital;
- Realizarea utilizind metoda „spin coating” a substratului fotosensibil;
- Studiul influenței timpului de expunere, numărului de straturi fotosensibile depuse, a turatiei cu care este depus fotorezistorul, respectiv dilutiei fotorezistorului utilizat;
- Proiectarea și realizarea aparaturii de laborator ce permite formarea imaginii folosind iluminarea Kohler;
- Rezultatele obtinute vor sta la baza realizarii tehnologiilor inovative de laborator de producere a acestor dispozitive tip senzor;
- Astfel, se vor desfasura activitati pentru stabilirea parametrilor de lucru, a aparaturii necesare, a modului de lucru, a bilantului de materiale și a consumurilor specifice la nivel laborator in vederea elaborarii tehnologiei de obtinere a straturilor senzitive;
- Se va redacta setul de parametri caracterizati electric pentru raspunsul dispozitivelor senzitive și valorile asteptate fara substanta senzitiva;
- Metodologia ce urmeaza a fi dezvoltata ,va include descrierea aparaturii și a instrumentelor care trebuie utilizate pentru efectuarea masuratorilor, precum și a punctele de reglaj.

4. Prezentarea rezultatelor:

4.1. Stadiul de implementare al proiectelor componente

Denumirea proiectului	Tipul rezultatului estimat	Stadiul realizării proiectului
	(studiu proiect, prototip, tehnolog, etc., alte rezultate)	
1. Tehnologii avansate pentru materiale dedicate sectoarelor energetice	Raport de cercetare. Esantioane de nanoparticule de argint, spectre XRD, imagini SEM, spectre EDS. Esantioane de aerogeluri metalice și hibride metal-polimer. Curbe reprezentand variatia rezistentei electrice în functie de gradul de comprimare.	S-au realizat eșantioane de nanofire de argint, imagini SEM, spectre EDX. S-au realizat eșantioane de aerogeluri metalice/hibride metal-polimer. S-au efectuat măsuratori de compresiune - rezistența electrică pentru materialele hibride obținute.
2. Grafenronică cu electrochimie cuantică de spin	Raport de cercetare. <i>Modelul reactivității chimice cuantice adoptat în termeni de conversie inter-moleculară HOMO-LUMO este unul viabil, capabil să susțină echilibrul interior al configurațiilor acizilor și bazelor tari și slabe a rotaxanilor în cazul mașinii moleculare/ciclului molecular dat, cu un mare grad de generalizare.</i> <i>Algoritmul „Nanomotor pe bază de rotaxan fotoactivat în 4 timpi (ultimul stadiu = primul stadiu)” este prezentat/aplicat gradual - ca paradigmă pentru alte sisteme similare: “deconstructia” pe etape observabile a mașinilor moleculare pe bază de rotaxani în general, urmată de analiza experimental</i>	Obiectivele initial propuse pentru aceste etape au fost indeplinite in totalitate, fiind finalizate toate obiectivele specifice asumate in cadrul respectivelor etape ale acestui proiect.

	termofotochimica și electrofotochimică pentru mașinile moleculare pe bază de rotaxani observabili.	
3. Tehnologii inovative de obtinere de dispozitive integrate de generare si stocare de energie electrica	<p>Tehnologii</p> <p>1. Tehnologie de obtinere de celule solare sensibilizate cu colorant pe substrat metalic;</p> <p>2. Tehnologie de obtinere de celule perovskitice pe baza de oxizi de cupru, fier si titan.</p> <p>Produce</p> <p>1. celula solara sensibilizata cu colorant (DSSC) pe baza de Fe_2O_3</p> <p>2. Celula solara sensibilizata cu colorant (DSSC) pe baza de Fe_3O_4</p> <p>3. Celulele solare sensibilizate cu colorant (DSSC-uri) pe baza de oxid de wolfram</p> <p>4. Celulele solare perovskitice pe baza de oxizi pe baza de cupru (CuO/Cu_2O) si oxizi de fier (Fe_2O_3) sau oxid de titan (TiO_2)</p> <p>5. Generatoare piezoelectrice pe baza de placate piezoelectrice flexibile pe baza de $(K_{0.5}Na_{0.5})_{1-x}Li_xNbO_3$ ($x=0.065$) dopat cu 1 mol% SCr, SFe, GCo, GMn au fost obtinute utilizind un substrat flexibil de policlorura de vinil expandata.</p>	<p>Obiectivul fazei a III-a partial, precum si indicatorii pentru monitorizare si evaluare au fost indepliniti in totalitate.</p> <p>Obiectivul fazei a III-a final, precum si indicatorii pentru monitorizare si evaluare au fost indepliniti in totalitate.</p> <p>Pe baza materialelor obtinute in faza I si II din 2019, in etapele din 2020 s-a realizat proiectarea, constructia, testarea si eficientizarea dispozitivelor de generare de energie electrica, parte din dispozitivul integrat, în scopul obtinerii dispozitivelor integrate de generare si stocare de energie electrica, <i>obiectivul principal al proiectului.</i></p>
4. Nanotehnologii inovative pentru obtinerea de materiale hibride avansate cu aplicatii in protectia mediului	<p>Studii.</p> <p>Electrozi modificati cu materiale perovskitice</p>	<p>Testarea comportamentului electrochimic;</p> <p>Activitatea electrocatalitica a electrozilor modificați cu perovskiti pentru reacția de degajare/ reducere a oxigenului.</p>
5. Complecși de incluziune supramoleculară a unor compuși naturali și de sinteză cu aplicații în sănătate	<p>Studiu.</p> <p>Raport de cercetare, lucrari stiintifice comunicate</p>	<p>Caracterizarea extractelor obtinute;</p> <p>Caracterizarea produsilor de sinteza obtinuti.</p>
6. Noi tehnologii aplicate in dezvoltarea unor dispozitive de tip senzor pentru monitorizarea mediului	<p>Raport de cercetare.</p> <p>Metode de obtinere.</p> <p>Procedee de lucru.</p> <p>Participari conferinte,</p> <p>Schite de ansamblu si detalii iluminarea Kohler adaptata microscopului LEVENHUK utilizat.</p>	<p>A fost realizata cu succes fotolitografierea unor electrozi interdigitali de Aur prin metoda fotorezistorului negativ;</p> <p>S-au obtinut pelicule de substanta fotosensibila pe substratul dorit, utilizind tehnica „spin coating”;</p> <p>Imaginea electrozilor interdigitali a fost obtinuta utilizind imaginea in negativ a obiectului dorit a fi fotolitografiat, respectiv metoda „wet etching” de realizare a imaginii in pozitiv pe substratul dorit (metoda de obtinere);</p>

		<p>A fost realizat dispozitivul experimental ce permite formarea imaginii folosind iluminarea Kohler; Au fost prezentate schitele de realizare a monturii microscopului.</p> <p>Procedee de lucru studiate: A fost studiată influența diluției materialului fotosensibil asupra calității imaginii obținute; A fost studiată influența turatiei la care s-a efectuat depunerea prin „spin coating”; A fost studiată influența numărului de straturi de substanță fotosensibilă depusă; A fost studiată influența timpului de expunere asupra rezoluției imaginii obținute.</p>
--	--	--

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

Tip	Nr. 37 realizat in anul 2020
Documentații	2
Studii	2
Lucrări	32
Plan realizare	-
Scheme constructive	-
Altele asemenea (se vor specifica) Schite de ansamblu si detalii iluminarea Kohler adaptata microscopului LEVENHUK utilizat	1

Din care:

4.2.1. Lucrări științifice publicate în jurnale cu factor de impact relativ ne-nul (2020):

Nr.	Titlul articolului	Numele Jurnalului, Volumul, pagina nr.	Nume Autor	Anul publicării	Scorul relativ de influență al articolului	Numărul de citări ISI
1	Neurotoxicity of Pesticides: The Roadmap for the Cubic Mode of Action	<i>Current Medicinal Chemistry</i> 27(1) (2020) 54 - 77; DOI: 10.2174/0929867326666190704142354	Bumbăciță B., Putz M.V.	2020	1.44/2019	-
2	QSAR by Minimal Topological Difference[s]. Post-Modern Perspectives	<i>Current Medicinal Chemistry</i> 27(1) (2020) 42 - 53; DOI: 10.2174/0929867326666190704124857	Duda-Seiman C., Duda-Seiman D., Ciubotariu D., Putz M.V.	2020	1.44/2019	-

3	Generalized topological efficiency – case study with C84 fullerene	<i>Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures</i> 28 (7) (2020) 545-550; DOI: https://doi.org/10.1080/1536383X.2020.1719482	Dobrynin A.A., Ori O., Putz M.V., Vesnin A.YU	2020	0.436/2019	-
4	Protein Interaction with Dendrimer Monolayers: Energy and Surface Topology	<i>Symmetry</i> 12 (2020) 641; DOI: 10.3390/sym12040641	Lungu, C.N.; Fustos, M.E.; Grudzinski, I.P.; Olteanu, G.; Putz M.V.	2020	0.55/2019	-
5	Topological Symmetry Transition between Toroidal and Klein Bottle Graphenic Systems	<i>Symmetry</i> 12 (2020) 1233; DOI: 10.3390/sym12081233	Putz M.V.; Ori O.	2020	0.55/2019	-
6	Fock-Space Coupled Cluster Theory: Systematic Study of Partial Fourth Order Triples Schemes for Ionization Potential and Comparison with Bondonic Formalism	<i>International Journal of Molecular Sciences</i> 21 (2020) 6199; DOI: 10.3390/ijms21176199	Basumallick, S.; Pal, S.; Putz M.V.	2020	2.247/2019	-
7	Ld/Mm+ Simulation of Some Aristolochic and Humic Acids Species Coupled in Periodic Box with Water	<i>Current Computer-Aided Drug Design</i> 16 (2020) in press 000-000; DOI: 10.2174/1573409916666200625141309	Petrescu, A.M.; Putz M.V.; Ifrim F.C.; Ilia, G.; Paunescu, V.	2020	0.267/2019	-
8	Experimental investigation of hydrogen insertion in copper oxide on photovoltaic performance of p-type dye-sensitized solar cell	INTERNATIONAL JOURNAL OF ENERGY RESEARCH DOI: 10.1002/er.6153	Vajda, M; Ursu, D; Duteanu, N; Miclau, M,	2020	AIS=0.518	-
9	Low lying valence band edge materials based on copper oxide for tandem dye - sensitized solar cells	Materials Letters, Volume: 275, Article Number: 128151, DOI:10.1016/j.matlet.2020.128151	Vajda, M; Ursu, D; Duteanu, N; Miclau, M.	2020	AIS=0.440	-
10	Investigation of physico-chemical features of lanthanum manganite with nitrogen addition	Journal of Alloys and Compounds. 843 (2020) 155854	Sfirloaga P., Sebarchievici I., Taranu B., Poienar M., Vlase, G., Vlase T., Vlazan P.	2020	4.650	-
11	Phase transitions in perovskite-type manganites and effect of Ag-doping on its physico-chemical properties	Journal of thermal analysis and calorimetry DOI: 10.1007/s10973-020-10095-1	Paula Sfirloaga, Gabriela Vlase, Titus Vlase, Iosif Malaescu, Catalin Nicolae Marin, Paulina Vlazan	2020	2.731	-
12	A computational study of the interactions between anthocyanins and cyclodextrins	Z. Naturforsch C J Bio., 2020;75(11-12):433-441. doi: 10.1515/znc-2020-0072	Raluca Pop, Adina Căta, Mariana Nela Ștefănuț, Ioana Maria Carmen Ienașcu	2020	1.238	-

4.2.2. Lucrări/comunicări științifice publicate la manifestări științifice (conferințe, seminarii, workshopuri, etc):

Nr. crt.	Titlul articolului, Manifestarea științifică, Volumul, Pagina nr.	Nume Autor	An apariție	Nr. citări ISI
1	Highly electroconductive porous structures coated with silver nanowires; PhysicsTIM20 Conference Timișoara, România.	Petrica Linul, Radu Banica, Oana Alexandra Grad, Emanoil Linul, Nicolae Vaszilcsin	2020	Amanat 2021 datorită pandemiei COVID-19
2	Low Density Hydroxiapatite Tridimensional Structures; PhysicsTIM20 Conference Timișoara, România.	Alexandra Ioana Bucur, Bogdan Ovidiu Taranu, Radu Banica, Petrica Linul, Cosmin Pascariu	2020	Amanat 2021 datorită pandemiei COVID-19
3	Cellulose fibers based aerogel; The 24th International Exhibition of Inventics "INVENTICA 2020" Iași, România.	Radu Bănică, Cristina Mosoarcă, Mihai Marghitas, Linul Petrica Andrei, Daniel Ursu	2020	-
4	<i>Complex Electro-Intra-Conversions within Rotaxanes' Molecular Machines</i> In: SOLAR ENERGY CONVERSION IN COMMUNITIES, Visa and A. Duta (eds.), Proceedings of the Conference for Sustainable Energy (CSE) 2020 Springer Proceedings in Energy, pp. 301-313 (Chapter 21), DOI 10.1007/978-3-030-55757-7 Hardcover ISBN: 978-3-030-55756-0 eBook ISBN: 978-3-030-55757-7 Springer International Publishing AG 2020 (Cham, Switzerland) ♣URL: https://doi.org/10.1007/978-3-030-55757-7_21	Iorga M.I., Dudaș N., Putz M.V.	2020	-
5	<i>Quantum Metrological Matrices for Sustainable Graphentronics</i> In: SOLAR ENERGY CONVERSION IN COMMUNITIES, Visa and A. Duta (eds.), Proceedings of the Conference for Sustainable Energy (CSE) 2020 Springer Proceedings in Energy, pp. 315-326 (Chapter 22), DOI 10.1007/978-3-030-55757-7 Hardcover ISBN: 978-3-030-55756-0 eBook ISBN: 978-3-030-55757-7 Springer International Publishing AG 2020 (Cham, Switzerland) ♣URL: https://doi.org/10.1007/978-3-030-55757-7_22	Buzatu D.L., Ianasi P., Putz M.V.	2020	-
6	Reinvestigation of blueberry anthocyanins for the dye-sensitized solar cells; 3rd International Conference on Emerging Technologies in Materials Engineering EmergeMAT No.3 / 2020, ISSN 2602-0416 Pag,105	Daiana-Alexandra Albulescu, Marinela Miclau, Anamaria Dabici, Daniel Ursu, Mihaela Birdeanu, Sabina Nitu, Lucian-Mircea Rusnac, Simona Popa	2020	-

7	Hydrothermal synthesis of CuGaO ₂ with 3D hierarchical flower-like for dye-sensitized solar cell applications; 3rd International Conference on Emerging Technologies in Materials Engineering EmergeMAT No.3 / 2020, ISSN 2602-0416 Pag.118	Daniel Ursu, Marinela Miclau, Radu Banica	2020	-
8	Copper oxide materials with low lying valence band edge for tandem dye-sensitized solar cells; 3rd International Conference on Emerging Technologies in Materials Engineering EmergeMAT No.3 / 2020, ISSN 2602-0416 Pag.119	Melinda Vajda, Daniel Ursu, Narcis Duteanu, Marinela Miclau	2020	-
9	Anthocyanin extracts from different plant matrices as potential natural food dyes, CHIMIA 2020-- <i>New Trends in Applied Chemistry</i> , 24-26 sept., Constanta, Romania	Căta A., Ienașcu I.M.C., Ștefănuț M.N.	2020	Amanat 2021 datorită pandemiei COVID-19
10	Synthesis and characterization of some N-(2-chloro-phenyl)-2-hydroxy-benzamide derivatives, CHIMIA 2020-- <i>New Trends in Applied Chemistry</i> , 24-26 sept., Constanta, Romania	Ienașcu I.M.C., Căta A., Moșoarcă C., Popescu I.M., Ștefănuț M.N.	2020	Amanat 2021 datorită pandemiei COVID-19
11	Glucosinolates from some Romanian species of <i>Brassicaceae</i> family, CHIMIA 2020-- <i>New Trends in Applied Chemistry</i> , 24-26 sept., Constanta, Romania	Ștefănuț M.N., Căta A., Vasilcsin C., Ienașcu I.M.C.	2020	Amanat 2021 datorită pandemiei COVID-19
12	Characterization of anthocyanin extracts from different plant matrices, The 26 th International Symposium on Analytical and Environmental Problems Szeged, Hungary, November 23-24.11.2020, Proceedings ISAEF 2020, p.103	Adina Căta, Ioana M. C. Ienașcu, Mariana N. Ștefănuț	2020	-
13	Synthesis and characterization of some n-(4-chloro-phenyl)-2-hydroxy-benzamide derivatives, The 26 th International Symposium on Analytical and Environmental Problems Szeged, Hungary, November 23-24.11.2020, Proceedings ISAEF 2020, p.164	Ioana M. C. Ienașcu, Adina Căta, Cristina Moșoarcă, Iuliana M. Popescu, Mariana N. Ștefănuț	2020	-
14	Natural compounds for <i>eco-friendly</i> corrosion inhibition of steel pipelines, The 26 th International Symposium on Analytical and Environmental Problems Szeged, Hungary, November 23-24.11.2020, Proceedings ISAEF 2020, p.326	Mariana Nela Ștefănuț, Adina Căta, Bogdan Țăranu, Paula Sfirloaga, Ioana Maria Carmen Ienașcu	2020	-
15	Improved piezoelectric properties in (K, Na)NbO ₃ lead free ceramics, Proceedings of the 26th International Symposium on Analytical and Environmental Problems Szeged, Hungary November 23-24, ISBN 978-963-306-771-0	Bucur Raul Alin, Farkas Iuliana, Bucur Alexandra Ioana	2020	-
16	Synthesis and characterization of "n-n"	Mircea Nicolaescu, Paulina	2020	-

	heterojunction based on TiO ₂ -ZnO materials, 3 RD INTERNATIONAL CONFERENCE ON EMERGING TECHNOLOGIES IN MATERIALS ENGINEERING 29-30 October, Bucharest, Romania	Vlazan, Cornelia Bandas, Corina Orha, Carmen Lazau, Viorel Serban		
17	Obtaining TiO ₂ with nanoporous structure by chemical corrosion and thermal oxidation of Ti foils. 26 th International Symposium on Analytical and Environmental Problems , Szeged, Hungary, 23-24. November 2020	Nicolaescu Mircea, Carmen Lazau, Corina Orha, Bandas Cornelia, Mina Popescu, Viorel Aurel Serban,	2020	-
18	Development of „n-p” heterojunctions based on n-type TiO ₂ and p-type CuMnO ₂ , integrated in sensitive modules, INVENTCOR, Deva, 30 noiembrie 2020	Lazau Carmen, Poienar Maria, Orha Corina-Ileana, Bandas Cornelia-Elena, Ursu Daniel-Horatiu, Vajda Melinda, Nicolaescu Mircea-Daniel,	2020	-

4.2.3. Lucrări publicate în alte publicații relevante:

Nr.	Titlul articolului	Numele Jurnalului, Volumul, Pagina nr.	Nume Autor	Anul publicării
1	Edited Book: NEW FRONTIERS IN NANO CHEMISTRY: CONCEPTS, THEORIES, AND TRENDS, 3-Volume Set: VOLUME 1: STRUCTURAL NANO CHEMISTRY VOLUME 2: TOPOLOGICAL NANO CHEMISTRY VOLUME 3: SUSTAINABLE NANO CHEMISTRY	Publisher: Apple Academic Press & CRC Press, Toronto-New Jersey, Canada-USA pp. 1479+index; ISBN: 978-1-771887-80-9 ♣URL: http://www.appleacademicpress.com/new-frontiers-in-nanochemistry-concepts-theories-and-trends-3-volume-set-volume-1-structural-nanochemistrybrvolume-2-topological-nanochemistrybrvolume-3-sustainable-nanochemistry/9781771887809	Editor: PUTZ M.V.	2020
2	Extracts from some Romanian <i>Brassicaceae</i> vegetables	Ovidius University Annals of Chemistry, Constanta, Romania	Mariana Nela Ștefănuț, Adina Căta, Radu Bănică, Raluca Pop, Ioana Maria Carmen Ienașcu	2020 (trimis spre publicare)

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 ministru	-	-
Decizie președinte	-	-
Standard	-	-
Altele (<i>se vor preciza</i>)	-	-

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

Tip eveniment	Nr. apariții	Nume eveniment:
web-site	1	https://www.noapteacercetatorilor.eu/timisoara
Emisiuni TV	-	
Emisiuni radio	-	
Presă scrisă/electronică	-	
Cărți	-	
Reviste	-	
Bloguri	-	
Altele (<i>se vor preciza</i>)	1	Prezentare la "Noaptea cercetatorilor europeni" 27.11.2019 – eveniment desfășurat on-line

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

Tip	Anul 2020
Tehnologii	2
Procedee	4
Produse informatice	-
Rețele	-
Formule	-
Metode	8
Altele asemenea (<i>se vor specifica</i>)	-

Din care:**4.3.1 Propuneri de brevete de invenție, certificate de înregistrare a desenelor și modelelor industriale și altele asemenea:**

	Nr. propuneri brevete	Anul înregistrării	Autorul/Autorii	Numele propunerii de brevet
OSIM	1	A/00671/2020	Lazau Carmen, Poienar Maria, Vlazan Paulina, Orha Corina, Bandas Cornelia, Nicolaescu Mircea, Vajda Melinda	Dezvoltarea de heterojonctiuni "N-P" pe baza de ZnO-CuMnO ₂ , integrabile in module sensitive de tip senzor
EPO	-	-	-	-
USPTO	-	-	-	-

4.4. Structura de personal:

Personal CD (Nr.)	Anul 2020
Total personal	57
Total personal CD	57
cu studii superioare	56

cu doctorat	44
doctoranzi	6

4.4.1 Lista personalului de cercetare care a participat la derularea Programului-nucleu:

Nr.	Nume și prenume	Grad	Funcția	Echivalent normă întreagă	Anul angajării	Nr. Ore lucrate/An* 2020
1.	Balcu Ionel	CSI	Director tehnic / Director general (din 25.11.2020)	0.82	1997	1550
2.	Bandas Cornelia Elena	CS II		0.82	2007	1550
3.	Banica Radu	CSII		0.84	2006	1598
4.	Birdeanu (Vasile) Mihaela-Ionela	CSII		0.82	2006	1558
5.	Birsan Nicolae	ACS		0.82	2015	1550
6.	Boc Ioan Daniel	CSIII		0.82	1996	1550
7.	Bucur (Ioitescu) Alexandra-Ioana	CSIII		0.82	2007	1550
8.	Bucur Raul Alin	CSIII	Sef lab.	0.84	2004	1598
9.	Buzatu Doru Laurentiu	CSIII	Sef comp.	0.84	2006	1584
10.	Cata Adina-Elena	CSIII		0.82	2006	1550
11.	Chirita Mihaila Ioan Marius	CSIII		0.82	2008	1550
12.	Dabici (Grozescu) AnaMaria	CSIII		0.82	2007	1550
13.	Dobrescu Marius Ciprian	CS		0.82	2008	1550
14.	Farkas (Badea) Iuliana	ACS		0.82	2010	1550
15.	Fitigau Firuta	CS III		0.16	2013	298
16.	Frigura Iliasa Flaviu	ACS	Sef comp.	0.83	2016	1572
17.	Gheorghe Damaris	ACS		0.82	2020	1550
18.	Gugoasa Livia Alexandra	CSIII		0.66	2012	1252
19.	Ianasi (Svera) Paula	ACS		0.82	2014	1550
20.	Ienascu Ioana Maria Carmen	CSIII		0.82	2008	1550
21.	Iorga Mirela Ioana	CSIII	Sef comp.	0.84	1996	1584
22.	Lazau Carmen	CSII	Sef lab.	0.82	2003	1553
23.	Linul Petrica	ing.		0.82	2014	1550
24.	Macarie Amalia Corina	CSIII		0.82	2004	1550
25.	Marghitas Mihai-Petru	tehn.		0.48	2020	915
26.	Miclau Marinela	CSII	Sef dept.	0.85	2001	1618
27.	Mihai Ruxandra	ACS		0.82	2019	1550
28.	Mirica Marius Constantin	CSII	Sef dept.	0.82	1998	1550

29.	Mirica Nicolae	CSI	Director general (până în 27 10.2020)	0.82	1996	1550
30.	Mocanu Liviu Lucian	CS		0.82	1996	1558
31.	Mosoarca Cristina	CS		0.82	2006	1550
32.	Negut Catalina	CS III		0.82	2017	1550
33.	Novaconi Stefan	CSI	Sef lab.	0.82	1996	1550
34.	Orha Ileana-Corina	CSIII		0.82	2000	1550
35.	Pandurescu Carmen	CS		0.82	1996	1550
36.	Pascariu Cosmin	ACS		0.41	2016	774
37.	Poienar Maria	CSIII		0.82	2006	1550
38.	Putz Mihai Viorel	CSI	Sef lab.	0.84	2015	1584
39.	Racu Andrei	CS		0.82	2014	1550
40.	Rosu Dan Cristian	CSIII		0.84	1996	1584
41.	Rus Florina Stefania	CSIII		0.82	2014	1550
42.	Sfirloaga Paula	CSII	Sef dept.	0.82	2003	1550
43.	Stancu Ionela	CS		0.16	2012	298
44.	State Ramona	CS III		0.82	2012	1550
45.	Stefanut Mariana Nela	CSII	Sef lab.	0.82	1996	1560
46.	Tanasie Cristian Dan	CSIII		0.66	2006	1252
47.	Taranu Bogdan Ovidiu	CSIII		0.82	2008	1550
48.	Taranu Ioan	CSI	Director stiintific	0.82	1996	1550
49.	Topciov Gheorghe	tehn.		0.33	2005	617
50.	Tudoran Marina Alexandra	ACS		0.82	2014	1550
51.	Urmosi Zoltan Gyula	CS	Sef comp.	0.82	2006	1550
52.	Ursu Daniel Horatiu	ACS		0.85	2008	1618
53.	Vaszilcsin Cristian George	CSIII		0.80	2006	1518
54.	Vlazan Paulina	IDTI		0.79	1998	1492
55.	Van Staden Jacobus Frederick	CSI		0.84	2007	1584
56.	Van Staden Raluca Ioana	CSI	Sef lab.	0.82	2007	1550
57.	Zamfir Alina Diana	CSI		0.82	2006	1550

* Se vor specifica numărul de ore lucrate în fiecare dintre anii de derulare ai Programului Nucleu, prin inserarea de coloane

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	Data achiziției	Valoarea achiziției	Sursa finanțării	Valoarea finanțării	Nr. Ore-om de utilizare a
-----	---------------------------------	-----------------	---------------------	------------------	---------------------	---------------------------

	de date...		(lei)		infrastructurii din bugetul Progr. Nucleu	infrastructurii pentru Programul-nucleu
1	-	-	-	-	-	-

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

	Nr.	Tip
Proiecte internaționale	-	<i>Ex. Orizont 2020, Bilateral, EUREKA, COST, etc.</i>
Proiecte naționale	2	
	1	<i>PN-III-P2-2.1-PED2020</i>
	1	<i>PN-III-P1-1.1-TE2020</i>

6. Rezultate transferate în vederea aplicării :

Tip rezultat	Instituția beneficiară (nume instituție)	Efecte socio-economice la utilizator
-	-	-

7. Alte rezultate:

- Premii la conferințe internaționale: CONCURSUL TINERILOR CERCETATORI EMERGEMAT, 3RD INTERNATIONAL CONFERENCE ON EMERGING TECHNOLOGIES IN MATERIALS ENGINEERING 29-30 October 2020, Bucharest, Romania: **Locul 2.** Daiana-Alexandra Albulescu, INCEMC, "Reinvestigation of Blueberry Anthocyanins for the Dye-Sensitized Solar Cells";
- CS II Dr. Marinela Miclău, Guest Editor, Special Issue: Fabrication of Electrodes for Dye-Sensitized Solar Cells, Journal: *Crystals*;
- Introducerea și dezvoltarea de domenii noi de cercetare în tematica INCEMC;
- Atragerea tinerilor talentați spre cariera de cercetare;
- Afirmare la nivel regional, unde firmele devin operatori cheie;
- Creșterea competitivității economiei românești prin inovare respectiv realizarea, prin aplicarea rezultatelor cercetării, a unei microproducții proprii;
- Atragerea tinerilor chimiști din diaspora, prin co-interesarea acestora în domenii noi de cercetare științifică;
- Creșterea vizibilității institutului pe plan național și internațional;
- Creșterea calității lucrărilor de cercetare științifică elaborate.

8. Aprecieri asupra derulării programului și propunerii:

Programul NUCLEU – Tehnologii nepoluante și inovative pentru sănătate, protecția mediului și eficiența energetică / TINSME al INCEMC Timișoara s-a derulat în condiții optime, nivelul finanțării / proiect fiind adecvat.

În cadrul prezentului Program Nucleu – Tehnologii nepoluante și inovative pentru sănătate, protecția mediului și eficiența energetică / TINSME, INCEMC-Timișoara, în urma analizei posibilităților privind dotarea și diversitatea resurselor umane de care dispune, precum și a experienței acumulate de-a lungul timpului, în deplină concordanță cu Strategia INCEMC pentru 2019–2022, cu Planul Multianual de dezvoltare al INCEMC 2019-2022 și cu CNCDI 2014-2020 și-a stabilit următoarele obiective prioritare::

- **Obiectiv 1.** Energii regenerabile și eficiență energetică
- **Obiectiv 2.** Protecția mediului și tehnologii curate
- **Obiectiv 3.** Sănătate și calitatea vieții
- **Obiectiv 4.** Tehnologii avansate (electrochimice / chimice / nanotehnologii)

Programul reflectă Strategia INCEMC pe perioada 2019 – 2022 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 principiul 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.

În cadrul Programului Nucleu, în limita sumelor alocate de către MEC în anul 2020 și conform punctajelor obținute la evaluarea programului nucleu au fost finanțate următoarele teme:

- **PN 19 22 01 01.** Tehnologii avansate pentru materiale dedicate sectoarelor energetice
- **PN 19 22 01 02.** Grafenonică cu electrochimie cuantică de spin
- **PN 19 22 01 03.** Tehnologii inovative de obtinere de dispozitive integrate de generare și stocare de energie electrică
- **PN 19 22 02 01.** Nanotehnologii inovative pentru obținerea de materiale hibride avansate cu aplicații în protecția mediului
- **PN 19 22 03 01.** Complecși de incluziune supramoleculară a unor compuși naturali și de sinteză cu aplicații în sănătate
- **PN 19 22 04 01.** Noi tehnologii aplicate în dezvoltarea unor dispozitive de tip senzor pentru monitorizarea mediului

Activitatea științifică desfășurată în cadrul obiectivelor prezentului program nucleu a avut ca rezultate:

OBIECTIVUL PN 19 22 01. ENERGII REGENERABILE ȘI EFICIENȚĂ ENERGETICĂ

- Sinteza nanostructurilor de argint și a spumelor flexibile impregnate cu nanoparticule de argint;
- Sinteza aerogelurilor pe baza de argint;
- Efectuarea măsurătorilor de compresiune - rezistența electrică pentru materiale hibride;
- Studiul sistemelor de mașini moleculare până la cel de-al 6-lea grad (!) al spectrelor tuturor compușilor implicați în proces, prin rezultatele pentru orbitalii moleculari cei mai înalți ocupați și cei mai de jos neocupați, HOMO (1) - HOMO (6) și, respectiv, LUMO (1) - LUMO (6);
- Cel mai interesant rezultat, deși nu direct observabil, și oricum nu în prima parte din ciclul global al mașinii moleculare, se referă la ciclul cuantic structural studiat al HOMO/LUMO-urilor interioare (în profunzime, intra-moleculare) implicate în tranziția electronică;
- Studiul prezent regăsește cu succes "cercul închis" al orbitalilor legați acoperind și explicând astfel mașina moleculară studiată (cu spectrele și orbitalii HOMO/LUMO 3D implicați), "cercul închis al orbitalilor" urmărește îndeaproape energiile libere Gibbs observate experimental, verificând încrucișat fiabilitatea în raport cu evenimentele cuantice observabile (spectre ale compușilor);
- Analiza cuantică a mașinii moleculare a revelat faptul că abordarea modernă HSAB care implică HOMO și LUMO de frontieră (implicând nivelurile "0" ale spectrului fundamental-excitat) poate fi extinsă la așa-numitele HOMO/LUMO intra-trans orbitalice (implicând orbitali de frontieră HOMO mai scăzuți și LUMO mai ridicați) pentru a explica, la nivel structural cuantic, mecanismul complex intra- și trans-electronic al conversiei compușilor macro-ciclului în interiorul ciclului mașinii moleculare;
- Modelul cuantic chimic actual este capabil să identifice mecanismul complex teoretic-structural corect la nivel intra-/trans-molecular asigurând schimbul exact de energie zero (pierdere vs. câștig energetic) pe un

- ciclu complet al mașinii moleculare, așa cum se poate verifica imediat în cazul datelor prezentate, conectat la orbitalii moleculari de frontieră selectați în cazul rotaxanilor chimici implicați în mașina moleculară de lucru;
- Prezentul model cuantic a fost în continuare verificat/aplicat la mecanismul foto-activat, iar valorile energiilor orbitalilor HOMO, LUMO au fost calculate prin metoda semiempirică (ZINDO/1) (Algoritm gradient conjugat Polak-Ribiere și optimizare geometrie într-un singur punct) din Hyperchem 7.01;
 - Obținere celule solare sensibilizate cu colorant (DSSC-uri) pe baza de oxizi de fier crescuti hidrotermal direct de placuta metalica de fier, folosind coloranti si electroliti organici., dupa cum urmeaza:
 - celulele solare sensibilizate cu colorant (DSSC-uri) pe baza de Fe_2O_3 crescut crescut „in situ” hidrotermal direct pe placuta metalica de fier cu PVP in solutia hidrotermala;
 - celulele solare sensibilizate cu colorant (DSSC-uri) pe baza de Fe_3O_4 crescut crescut „in situ” hidrotermal direct pe placuta metalica de fier cu EC in solutia hidrotermala;
 - optimizarea parametrilor de sinteza a filmelor de oxid de fier in functie de eficienta DSSC-urilor;
 - optimizarea celulelor solare de tip n DSSC prin alegerea colorantului si electrolitului optim;
 - identificarea problemelor tehnologice ce limiteaza inca eficienta celulelor solare, urmand a fi rezolvate in continuarea etapei a treia.
 - Obținere celule solare (sensibilizate cu colorant-DSSC si perovskitice) si generatoare piezoelectrice au fost obtinute, dupa cum urmeaza:
 - Celulele solare sensibilizate cu colorant (DSSC-uri) pe baza de oxid de wolfram crescut „in situ” hidrotermal sau termic in atmosfera controlata oxidativa direct pe placuta metalica de wolfram;
 - S-a demonstrat efectul benefic al hidrogenului suplimentar asupra oxizilor de cupru, prin promovarea ancorarii colorantului (chemisorbtia puternica a gruparilor de ancorare $-\text{COOH}$ pe substratul semiconductor), ducand astfel la o îmbunătățire cu 98% a curentului de scurt-circuit JSC și, implicit, la îmbunătățirea eficienței de conversie a energiei solare a DSSC de tip-p;
 - Pe baza valorii ridicate a fototensiunii estimate (2.10 V), materialul pe baza de $\text{Cu}_2\text{O}/\text{CuO}$ apare ca fiind cea mai bună alegere in proiectarea fotocatozilor extrem de eficienți în DSSC de tip-tandem. Implementarea și testarea acestuia este insa condiționata de proiectarea și sintetiza a noi coloranți organici ca sensibilizatori pentru DSSC de tip-p, caracterizati prin niveluri de energie HOMO mai mari de 1.605 V față de NHE;
 - Celulele solare perovskitice pe baza de oxizi pe baza de cupru ($\text{CuO}/\text{Cu}_2\text{O}$) si oxizi de fier (Fe_2O_3) sau oxid de titan (TiO_2);
 - Valorile curentului mici pentru toate seriile de filme se datoreaza faptului ca, prepararea si depunerea materialului de perovskite de tipul $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ trebuie sa fie efectiv in mediu inert. De aceea este absolut necesar achizitionarea unui glovebox unde sa se poata efectua prepararea si depunerea materialului perovskite in diferite medii inerte. Interactiunea cu aerul duce la o oxidare a materialului si implicit la o scadere a puterii de absorbtie a fotonilor;
 - Generatoare piezoelectrice pe baza de placute piezoelectrice flexibile pe baza de $(\text{K}_{0.5}\text{Na}_{0.5})_{1-x}\text{Li}_x\text{NbO}_3$ ($x=0.065$) dopat cu 1 mol% SCr, SFe, GCo, GMn au fost obtinute utilizind un substrat flexibil de policlorura de vinil expandata avind rolul de strat suport. Optimizarea celulelor solare de tip n DSSC prin alegerea colorantului si electrolitului optim.

OBIECTIVUL PN 19 22 02. PROTECȚIA MEDIULUI ȘI TEHNOLOGII CURATE

- Electrozi modificați cu materiale perovskitice de tipul manganit de lantan, dopate cu diferite concentrații de azot.
- Studiul influenței concentrației dopantului din structura perovskitică asupra comportamentului capacitiv al electrozilor, cat și a comportamentul electrochimic al acestora în prezență fericianurii de potasiu.
- Calculul suprafețelor electroactive și a coeficienților de difuzie pentru toți electrozii modificați cu compuși perovskitici prin cele 4 proceduri de depunere.
- Cele trei studii electrochimice au dus la identificarea electrozilor modificați cu perovskiti care au cele mai bune proprietăți electrocatalitice pentru reacția de degajare a oxigenului, de reducere a hidrogenului, respectiv de oxidare a azotului.
- Stabilirea celui mai performant electrod – din studiul proprietăților electrocatalitice pentru reacția de reducere a oxigenului ale electrozilor modificați cu perovskiti, rezultatele preliminare au indicat că electrodul

din grafit modificat prin depunerea din suspensie în etanol a unei compoziții din LaMnO_3 dopat cu 0,1% Ag și carbon conductiv este cel mai performant.

OBIECTIVUL PN 19 22 03. SĂNĂTATE ȘI CALITATEA VIEȚII

- Caracterizarea extractelor de compuși naturali din matrici autohtone prin diverse metode: determinarea activităților antioxidante, metodele DPPH și FRAP;
- Determinarea conținutului total de fenoli- metoda Folin-Ciocalteu;
- Separarea și identificarea glucosinolaților și antocianinelor, cu ajutorul standardelor interne, prin HPLC;
- Caracterizarea compușilor de sinteză prin spectrele $^1\text{H-RMN}$ și $^{13}\text{C-RMN}$, spectre FT-IR, puncte de topire (structuri sintetice confirmate prin analize spectrale).

OBIECTIVUL PN 19 22 04. TEHNOLOGII AVANSATE (ELECTROCHIMICE / CHIMICE / NANOTEHNOLOGII)

- Realizarea prin fotolitografie a imaginii unui electrod interdigital;
- Realizarea utilizând metoda „spin coating” a substratului fotosensibil;
- Studiul influenței timpului de expunere, numărului de straturi fotosensibile depuse, a turatiei cu care este depus fotorezistorul, respectiv diluției fotorezistorului utilizat;
- Proiectarea și realizarea aparaturii de laborator ce permite formarea imaginii folosind iluminarea Kohler.

În cadrul celor 6 proiecte finanțate în cursul anului 2020, au fost obținute o serie de rezultate valoroase care confirmă posibilitatea dezvoltării de cercetări aplicative sau de frontieră în vederea inițierii de noi proiecte de cercetare în cadrul programelor naționale și internaționale.

Astfel, pe parcursul anului 2020 rezultatele obținute în urma cercetărilor efectuate în cadrul prezentului Program Nucleu – **Tehnologii nepoluante și inovative pentru sanătate, protecția mediului și eficiența energetică / TINSME** – s-au concretizat prin publicarea și comunicarea de lucrări științifice.

- problematica abordată a fost diversă, din domeniile energiei regenerabile, sănătății, chimiei organice, 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;
- s-a participat la 5 manifestări științifice (congrese internaționale, simpozioane, seminarii, conferințe) din domeniu, cu un număr de 13 de lucrări științifice;
- s-au transmis 5 lucrări la încă 2 manifestări științifice (congrese internaționale, simpozioane, seminarii, conferințe), care din cauza pandemiei au fost amânate pentru anul 2021;
- au fost publicate/sunt în curs de publicare în reviste cu referenți de specialitate un număr de 12 lucrări științifice în străinătate și 1 în țară;
- a fost editată 1 carte (3 vol.) la o editură din străinătate;
- a fost depusă 1 cerere de brevet la OSIM București;
- s-au realizat prezentări la “Noaptea cercetătorilor europeni”, 27.11.2020 –Timisoara, eveniment desfășurat online;
- 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.

Considerăm 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.

Proiectele abordate în cadrul prezentului Program Nucleu – **Tehnologii nepoluante și inovative pentru sanătate, protecția mediului și eficiența energetică / TINSME** – sunt dezvoltate în concordanță cu direcțiile de cercetare prevăzute în strategia INCEMC.

Chiar și în condițiile extrem de dificile pe care le-a implicat anul 2020 datorate pandemiei de Covid-19, obiectivele specifice fiecărui proiect din cadrul Programului Nucleu au fost **îndeplinite** la termenele prevăzute și în bugetul aprobat, nivelul științific al acestora fiind corespunzător cerințelor. În cazul câtorva lucrări științifice aprobate pentru susținere la 2 manifestări științifice care s-au amânat pentru anul 2021, susținerea acestora se va face în momentul în care va fi reprogramată manifestarea respectivă.

În cadrul celor 6 proiecte selectate și finanțate în 2020, au fost obținute o serie de rezultate valoroase care vor constitui **baza dezvoltării de cercetări aplicative sau de frontieră pentru inițierea de noi proiecte de cercetare în cadrul programelor naționale și internaționale.**

Având în vedere aceste rezultate, propunem continuarea în 2021 a unor proiectelor de cercetare începute 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. Rezultatele obținute vor constitui baza aplicațiilor institutului la proiecte naționale și internaționale. Prin prezentul program nucleu se vor dezvolta **noi teme** în institut pentru a avea posibilitatea de testare a unor viitoare aplicații la programe mari naționale și internaționale.