

Contractor : INSTITUTUL NAȚIONAL DE C-D PENTRU ELECTROCHIMIE ȘI MATERIE CONDENSATĂ – INCEMC - TIMIȘOARA
Cod fiscal : R 9364218

RAPORT ANUAL DE ACTIVITATE
privind desfășurarea programului nucleu
Tehnologii nepoluante si inovative pentru sanatate, protectia mediului si eficienta
energetica, TINSME, PN 19 22
anul 2021

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 vieții.

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 vieții – 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 vieții.

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 liofilizării diverselor materiale 3D; sinteza structurilor tridimensionale pe bază de nanofire metalice pentru fabricarea supercapacitorilor; fabricarea structurilor tridimensionale pe bază de materiale anorganice pentru realizarea varistoarelor și a membranelor; obținerea aerogelurilor pe bază de grafit funcționalizat cu adaos de compozite; caracterizarea aerogelurilor; analiza morfologică și structurală a materialelor compozite; modelarea reactivității chimice de spin a unui sistem auto-electrochimic pentru estimarea energiei de stocare (la fiecare astfel de ciclu electrochimic intern) în urma energiilor eliberate prin destabilizare și restabilizare electronică; investigarea procesului acido-bazic pe baza principiului HSAB, în varianta Parr-Pearson, prin care energia transferată/stocată, într-un ciclu de transformare acido-bazic, fenomen electrochimic indus, se scrie în mod aditiv (viz. principiul de superpoziție cuantică); verificarea condiției de optim energetic (stocare), prin minimizarea contribuției HOMO-LUMO pe ciclul supra-molecular în raport cu tăria chimică în condițiile în care variația de electronegativitate $\Delta\chi$ și tăria chimică a contra-partenerului η_B sunt menținute constante (sunt stabilizate); alcătuirea tabloului complet energetic (calculul de spectre HOMO și LUMO) pentru optimizarea cuplărilor energetice inter-bandă la funcționalizarea ciclului mașinilor moleculare cu structura de grafen, pentru depunere matriceală; caracterizarea cuantică a acoperirii nanospațiului; caracterizarea tunelării cuantice prin Bondoni; modelarea transformării nano-topologice în prima zonă Brillouin; corelarea primitivei de tip Wigner-Seitz cu densitate de flux zero în structuri bondonice multi-strat; proiectarea, construcția, testarea și eficientizarea dispozitivelor de stocare de energie electrică; optimizarea metodei hidrotermale pentru obținerea de cantități necesare pentru realizarea electrodului pozitiv al bateriei pe baza de Mn; eficientizarea materialelor – stabilitate mai mare în procesul de încărcare-descărcare a ionilor de litiu; determinarea și optimizarea parametrilor hidrotermali care favorizează și stabilizează faza cristalină $\text{Li}_4\text{Mn}_2\text{O}_5$; determinarea și optimizarea parametrilor hidrotermali care favorizează și stabilizează faza cristalină $\text{Li}_4\text{V}_{0.6}\text{Mn}_{1.4}\text{O}_5$; determinarea și optimizarea parametrilor hidrotermali care favorizează și stabilizează faza cristalină $\text{Li}_4\text{Cr}_{0.6}\text{Mn}_{1.4}\text{O}_5$.

Dezvoltarea acestor direcții conduce la rezolvarea și finalizarea următoarelor tematici:

- realizarea liofilizării diverselor materiale 3D;
- sinteza structurilor tridimensionale pe bază de nanofire metalice pentru fabricarea supercapacitorilor;
- fabricarea structurilor tridimensionale pe bază de materiale anorganice (cum este grafitul) pentru realizarea varistoarelor și a membranelor;
- obținerea aerogelurilor pe bază de grafit funcționalizat cu adaos de compozite;
- caracterizarea aerogelurilor pe bază de carbon – cu diferite adaosuri în compoziție (celuloză) în vederea îmbunătățirii rezistenței mecanice;
- analiza morfologică și structurală a materialelor compozite prin SEM, FT-IR, UV-VIS, TG și XRD;
- modelarea reactivității chimice de spin la sistemul auto-electrochimic din faza precedentă (*Stocarea de Speța a II-a a Energiei Mașinilor Moleculare Grafenice*) pentru estimarea energiei de stocare (la fiecare astfel de ciclu electrochimic intern) în urma energiilor eliberate prin destabilizare și restabilizare electronică, în stare izolată – respectiv pe suport grafenic;
- studiul realizat are la bază tot un complex rotaxanic, dar care conține ca roată o calixarenă (tris(N-fenilureido)-calix[6]arenă) și axul format din unități de 4,4'-bipiridin-dicationice cu substituenți diferiți;
- din perspectivă cuanto-mecanică, legarea supramoleculară interblocată pare să se comporte ca un sistem electrochimic dinamic cu izosuprafața densității de sarcină totală 3D ce este limitată spațial între două izosuprafețe potențiale 3D având rolurile dopurilor sterice într-o mașină moleculară integrată;
- abordarea fenomenului legăturii chimice prin tunelarea cuantică mai degrabă decât prin suprapunerea/interferența cu funcțiile de undă cuantică;
- cercetarea unei metodologii de acoperire completă a nano-spațiului pentru structuri chimice topologice, de tip grafenic, cu reprezentarea cuanto-geometrică a impurităților de goluri nano-spațiale;
- investigarea metodologiei nano-acoperirii prin recuperarea fenomenologiei legăturii chimice de tip cvasiparticulă cuantică ca agent de informație în nano-umpluturi, golurile potențiale trebuind tratate atât pentru structurile chimice asimetrice, cât și pentru cele simetrice extinse sau, în general, reduse topologic;

- implementarea operației topologice de tip Capra, ce oferă pentagulația cuantică bondonică necesară, recuperând analogul nano-topologic al primitivei Wigner-Seitz în rețelele periodice;
- stabilirea legăturii directe cu spațiul k-reciproc al vectorilor de undă și al zonelor Brillouin asociate structurilor electronice (bosonic) condensate multi-strat;
- proiectarea, construcția, testarea și eficientizarea dispozitivelor de stocare de energie electrică;
- optimizarea metodei hidrotermale pentru obținerea de cantități necesare pentru realizarea electrodului pozitiv al bateriei pe baza de Mn prin utilizarea unei etape intermediare de agitare sub temperatura controlată, pentru a mări solubilitatea materialelor precursor;
- eficientizarea materialelor prin utilizarea unei temperaturi de sinteză hidrotermală de 250 °C și a timpului de reacție de 48 h pentru a asigura o mai bună cristalizare și astfel o mare stabilitate a materialelor în procesul de încărcare-descărcare a ionilor de litiu;
- obținerea materialelor pentru baterii de tipul $\text{Li}_4\text{Mn}_2\text{O}_5$;
- determinarea și optimizarea parametrilor hidrotermali care favorizează și stabilizează faza cristalină $\text{Li}_4\text{Mn}_2\text{O}_5$, voltamograma ciclică demonstrând capacitatea acestui material de a fi folosit în dispozitivele de stocare a energiei;
- obținerea materialelor pentru baterii de tipul $\text{Li}_4\text{V}_{0.6}\text{Mn}_{1.4}\text{O}_5$;
- determinarea și optimizarea parametrilor hidrotermali care favorizează și stabilizează faza cristalină $\text{Li}_4\text{V}_{0.6}\text{Mn}_{1.4}\text{O}_5$, valoarea mare a potențialului de oxidare pune în evidență efectul benefic al substitutiei V de către Mn; instabilitatea structurii cristaline reprezintă un dezavantaj pentru utilizarea acestui material ca și dispozitiv de stocare a energiei;
- obținerea materialelor pentru baterii de tipul $\text{Li}_4\text{Cr}_{0.6}\text{Mn}_{1.4}\text{O}_5$;
- determinarea și optimizarea parametrilor hidrotermali care favorizează și stabilizează faza cristalină $\text{Li}_4\text{Cr}_{0.6}\text{Mn}_{1.4}\text{O}_5$, valoarea mare a potențialului de oxidare pune în evidență efectul benefic al substitutiei Cr de către Mn; instabilitatea structurii cristaline reprezintă un dezavantaj pentru utilizarea acestui material ca și dispozitiv de stocare a energiei;
- obținerea de dispozitive integrate de generare și stocare de energie electrică, obiectivul principal al proiectului, implică ca în etapa următoare, să se realizeze proiectarea și construcția unei baterii termice, parte din dispozitivul integrat;
- 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 2021, au fost abordate următoarele proiecte:

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

- Sinteza unor materiale poroase pe bază de grafit funcționalizat pentru aplicații în supercapacitori

În etapa derulată în anul 2021 s-au realizat următoarele activități:

- Obținerea grafitului funcționalizat;
- Obținerea și caracterizarea aerogelurilor pe bază de carbon – cu diferite adaosuri în compoziție (celuloză) în vederea îmbunătățirii rezistenței mecanice;
- Analiza morfologică și structurală a materialelor compozite prin SEM, FT-IR, UV-VIS, TG și XRD.

Pentru atingerea obiectivului principal al proiectului, în primul rând s-a realizat liofilizarea diverselor materiale 3D, urmând ca pentru fabricarea supercapacitorilor să fie necesară sinteza structurilor tridimensionale pe bază de nanofire metalice și pentru fabricarea varistoarelor și a membranelor să fie necesară fabricarea structurilor tridimensionale pe bază de materiale anorganice cum este grafitul. S-au obținut aerogeluri pe bază de grafit funcționalizat cu adaos de compozite.

- **PN 19 22 01 02. Grafenronică cu electrochimie cuantică de spin.** Acesta a avut în componența lui etapele:
 - Mașini Moleculare cu Grafen Fotoactivat. Reactivitatea electrochimică cu mașini moleculare de spin - final
 - Electrochimia Cuantică cu Grafen. Controlul Nano-Imagistic al Tunelării Cuantice pe Grafen multistrat

În etapele derulate în anul 2021 s-au realizat următoarele activități:

- Investigarea procesului acido-bazic pe baza principiul "Hard and Soft Acids and Bases" (HSAB), în varianta Parr-Pearson, prin care energia transferată/stocată, într-un ciclu de transformare acido-bazic, fenomen electrochimic indus, se scrie în mod aditiv (viz. principiul de superpoziție cuantică);
- Verificarea condiției de optim energetic (stocare), prin minimizarea contribuției HOMO-LUMO pe ciclul supra-molecular în raport cu tăria chimică în condițiile în care variația de electronegativitate $\Delta\chi$ și tăria chimică a contra-partenerului η_B sunt menținute constante (sunt stabilizate);
- Alcătuirea tabloului complet energetic (calculul de spectre HOMO și LUMO) pentru optimizarea cuplărilor energetice inter-bandă la funcționalizarea ciclului mașinilor moleculare cu structura de grafen, pentru depunere matriceală;
- Caracterizarea cuantică a acoperirii nanospațiului;
- Caracterizarea tunelării cuantice prin Bondoni;
- Modelarea transformării nano-topologice în prima zonă Brillouin;
- Corelarea primitivei de tip Wigner-Seitz cu densitate de flux zero în structuri bondonice multi-strat.

➤ **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 etapa:

- Proiectarea, constructia, testarea si eficientizarea dispozitivelor de stocare de energie electrica

În etapele derulate în anul 2021 s-au realizat următoarele activități:

- Optimizarea materialelor de tipul $Li_4(M,Mn)_2O_5$ unde $M=V,Cr$ pe baza voltametriei ciclice;
- Proiectarea, construirea si testarea unui dispozitivul de analiza a caracteristicii de incarcare/ descarcare a bateriilor pe baza de Li si Mn.

Obiectivul PN 19 22 02. Protecția mediului și tehnologii curate are în vedere studiul unor aspecte privind: depunerea de filme subtiri pe sticla de FTO de material de tipul $LaMnO_3$ nedopat si dopat cu pamanturi rare si metale de tranzitie; caracterizarea fizico-chimica a filmelor subtiri; functionalizarea materialelor perovskitice pe baza de $LaMnO_3$ dopat cu Ag; analiza morfo structurala a materialelor hibride obtinute; analiza parametrilor texturali.

Dezvoltarea acestor direcții conduce la rezolvarea și finalizarea următoarelor tematici:

- depunerea materialului de tipul $LaMnO_3$ nedopat si dopat cu pamanturi rare si metale de tranzitie sub forma de filme subtiri pe sticla de FTO;
- caracterizarea fizico-chimica a filmelor subtiri prin difracție de raze X, microscopie electronica de baleiaj, spectroscopie Raman, analiza morfologica prin microscopie de forta atomica;
- functionalizarea materialelor perovskitice pe baza de $LaMnO_3$ dopat cu Ag prin metoda cu ultrasunete cu sonotroda imersata in mediul de reactie;
- analiza morfo structurala a materialelor hibride obtinute, prin: difracție de raze X, spectroscopie FT-IR, spectroscopie Raman;
- analiza parametrilor texturali, folosind metoda multi BET (Brunauer – Emmett – Teller) a fost determinată suprafața, iar metoda BJH (Barrett, Joyner și Halenda) a fost utilizată pentru a determina distribuția mărimii porilor;
- 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;
- 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 2021, 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:

- Obținerea de filme subtiri modificate cu compusi perovskitici
- Functionalizarea materialelor perovskitice cu montmorilonit – partial
- Functionalizarea materialelor perovskitice cu montmorilonit - final

În etapele derulate în anul 2021 s-au realizat următoarele activități:

- Depunerea materialului de tipul LaMnO_3 nedopat și dopat cu pamnturi rare și metale de tranziție sub forma de filme subțiri pe sticla de FTO;
- Caracterizarea fizico-chimică a filmelor subțiri prin difracție de raze X, microscopie electronică de baleiaj, spectroscopie Raman, analiza morfologică prin microscopie de forță atomică;
- Funcționalizarea materialelor perovskitice pe baza de LaMnO_3 dopat cu Ag prin metoda cu ultrasunete cu sonotroda imersată în mediul de reacție;
- Analiza morfo structurală a materialelor hibride obținute, prin: difracție de raze X, spectroscopie FT-IR, spectroscopie Raman, analiza parametrilor texturali, folosind metoda multi BET (Brunauer – Emmett – Teller) a fost determinată suprafața, iar metoda BJH (Barrett, Joyner și Halenda) a fost utilizată pentru a determina distribuția mărimii porilor.

Obiectivul PN 19 22 03. Sănătate și calitatea vieții are în vedere studiul unor aspecte privind: obținerea în fază lichidă și solidă a complexilor ciclodextrină/compuși naturali și a complexilor ciclodextrină/compuși sintetici; studii computaționale de andocare moleculară a compușilor studiați (compuși cu sulf, antocianine, salicină, compuși de sinteză derivați de salicilamidă) pe molecula-țintă (ciclodextrine); evidențierea complexilor de incluziune cu cea mai mare afinitate de legare; formarea complexilor de incluziune în fază lichidă - spectrofotometric; includerea în ciclodextrine a compușilor biologic activi studiați (în fază solidă); caracterizarea parțială a complexilor în fază solidă ciclodextrină/compuși naturali și a complexilor ciclodextrină/compuși sintetici; caracterizarea fizico-chimică a complexilor de incluziune obținuți.

Dezvoltarea acestor direcții conduce la rezolvarea și finalizarea următoarelor tematici:

- obținerea în fază lichidă și solidă a complexilor ciclodextrină/compuși naturali și a complexilor ciclodextrină/compuși sintetici;
- realizarea unor studii computaționale de andocare moleculară a compușilor studiați (compuși cu sulf, antocianine, salicină, compuși de sinteză derivați de salicilamidă) pe molecula-țintă (ciclodextrine);
- evidențierea complexilor de incluziune cu cea mai mare afinitate de legare;
- formarea complexilor de incluziune în fază lichidă prin determinarea stoechiometriei de complexare și a anumitor parametri termodinamici – realizată spectrofotometric.
- includerea în ciclodextrine a compușilor biologic activi studiați (în fază solidă), folosind ca metode de complexare triturarea (frământarea), co-precipitarea, metoda în sistem etanol-apă;
- caracterizarea parțială a complexilor în fază solidă ciclodextrină/compuși naturali și a complexilor ciclodextrină/compuși sintetici;
- caracterizarea fizico-chimică a complexilor de incluziune obținuți prin următoarele tehnici: spectrometrie FTIR, difracția de raze X RX, spectrofotometrie UV-VIS-NIR, microscopie electronică de baleiaj SEM și analiza termică (analiza termogravimetrică TG, analiza calorimetrică diferențială DSC); rezultatele obținute au confirmat obținerea complexilor de incluziune.
- 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 2021, 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 etapele:
 - Obținerea complexilor de incluziune ciclodextrine-compuși naturali și de sinteză în fază lichidă și solidă
 - Caracterizarea compușilor de incluziune obținuți - parțial

În etapa derulată în anul 2021 s-au realizat următoarele activități:

- Studii computaționale de andocare moleculară a compușilor studiați (compuși cu sulf, antocianine, salicină, compuși de sinteză derivați de salicilamidă) pe molecula-țintă

(ciclodextrine) care au condus la evidențierea complexilor de incluziune cu cea mai mare afinitate de legare;

- Evaluarea spectrofotometrică a formării complexilor de incluziune în fază lichidă, cu determinarea stoechiometriei de complexare și a anumitor parametri termodinamici;
- În fază solidă, compușii biologic activi studiați au fost incluși în ciclodextrine, folosind ca metode de complexare triturarea (frământarea), co-precipitarea, metoda în sistem etanol-apă;
- Caracterizarea parțială a complexilor în fază solidă ciclodextrină/compuși naturali și a complexilor ciclodextrină/compuși sintetici;
- Caracterizarea fizico-chimică a complexilor de incluziune obținuți prin: spectrometrie FTIR, difracția de raze X RX, spectrofotometrie UV-VIS-NIR, microscopie electronică de baleiaj SEM și analiză termică (analiza termogravimetrică TG, analiza calorimetrică diferențială DSC).

Obiectivul PN 19 22 04. Tehnologii avansate (electrochimice / chimice / nanotehnologii) are în vedere studiul unor aspecte privind: realizarea imaginii unui electrod interdigital prin fotolitografie; obținerea substratului fotosensibil și a substratului conductor electric; stabilirea parametrilor de lucru: timpul optim de expunere, respectiv diluția optimă a fotorezistorului utilizat și a influenței diluției substanței utilizate la corodarea chimică, respectiv a timpului optim de corodare chimică; obținerea și testarea electrozilor interdigitali de tipul linie de întârziere.

Dezvoltarea acestor direcții conduce la rezolvarea și finalizarea următoarelor tematici:

- realizarea imaginii unui electrod interdigital prin metoda fotolitografiei;
- obținerea substratului fotosensibil prin metoda metoda „spin coating”;
- obținerea substratului conductor electric prin metoda evaporare termică;
- stabilirea parametrilor de lucru: timpul optim de expunere, respectiv diluția optimă a fotorezistorului utilizat;
- stabilirea influenței diluției substanței utilizate la corodarea chimică, respectiv a timpului optim de corodare chimică;
- obținerea electrozilor interdigitali de tipul linie de întârziere;
- testarea electrozilor interdigitali de tipul linie de întârziere;
- 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 2021, 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 etapele:

- Proiectarea și realizarea dispozitivului de senzori pe baza de joncțiuni p-n de tipul. $\text{TiO}_2\text{-CuMnO}_2$, ZnO-CuMnO_2 , care prezintă comportament de dioda
- Testarea dispozitivelor de tip SUAS pentru detectia gazelor de sera (NO_x și CO_x)

În etapele derulate în anul 2021 s-au realizat următoarele activități:

- Realizarea imaginii unui electrod interdigital prin metoda fotolitografie;
- Obținerea substratului fotosensibil prin metoda metoda „spin coating” și a substratului conductor electric prin metoda evaporare termică;
- Stabilirea parametrilor de lucru: timpul optim de expunere, respectiv diluția optimă a fotorezistorului utilizat, influența diluției substanței utilizate la corodarea chimică, respectiv a timpului optim de corodare chimică;
- Obținerea și testarea electrozilor interdigitali de tipul linie de întârziere.

2.2. Proiecte contractate:

Cod obiectiv	Nr. proiecte contractate	Nr. proiecte finalizate	Anul 2021
1. PN 19 22 01	3	-	3
2. PN 19 22 02	1	-	1
3. PN 19 22 03	2	-	1
4. PN 19 22 04	1	-	1
Total:	7	-	6

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

	Anul 2021
I. Cheltuieli directe	3.825.674
1. Cheltuieli de personal	3.661.143
2. Cheltuieli materiale și servicii	164.531
II. Cheltuieli Indirecte: Regia	1.909.700
III. Achiziții / Dotări independente din care:	4.357
1. pentru construcție/modernizare infrastructura	0
TOTAL (I+II+III)	5.739.731

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 2021, 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

- Realizarea liofilizării diverselor materiale 3D;
- Sinteza structurilor tridimensionale pe bază de nanofire metalice pentru fabricarea supercapacitorilor;
- Fabricarea structurilor tridimensionale pe bază de materiale anorganice (cum este grafitul) pentru realizarea varistoarelor și a membranelor;
- Obținerea aerogelurilor pe bază de grafit funcționalizat cu adaos de compozite;
- Obținerea eșantioanelor de probă, de structuri 3D (aerogeluri) pe bază de fibre celulozice și compozite, mase anorganice cu și fără adaosuri de grafit;
- Caracterizarea aerogelurilor pe bază de carbon – cu diferite adaosuri în compoziție (celuloză) în vederea îmbunătățirii rezistenței mecanice;
- Analiza morfologică și structurală a materialelor compozite;
- Caracterizarea prin realizarea de spectre XRD, imagini SEM, spectre FTIR, spectre de reflectanță difuză UV-VIS și TG;
- Modelarea reactivității chimice de spin la sistemul auto-electrochimic din faza precedentă (*Stocarea de Speța a II-a a Energiei Mașinilor Moleculare Grafenice*) pentru estimarea energiei de stocare (la fiecare astfel de ciclu electrochimic intern) în urma energiilor eliberate prin destabilizare și restabilizare electronică, în stare izolată – respectiv pe suport grafenic;
- Investigarea procesului acido-bazic pe baza principiului “Hard and Soft Acids and Bases” (HSAB), în varianta Parr-Pearson, prin care energia transferată/stocată, într-un ciclu de transformare acido-bazic, fenomen electrochimic indus, se scrie în mod aditiv (viz. principiul de superpoziție cuantică);

- Verificarea condiției de optim energetic (stocare), prin minimizarea contribuției HOMO-LUMO pe ciclul supra-molecular în raport cu tăria chimică în condițiile în care variația de electronegativitate $\Delta\chi$ și tăria chimică a contra-partenerului η_B sunt menținute constante (sunt stabilizate);
- Alcătuirea tabloului complet energetic (calculul de spectre HOMO și LUMO) pentru optimizarea cuplărilor energetice inter-bandă la funcționalizarea ciclului mașinilor moleculare cu structura de grafen, pentru depunere matriceală;
- Abordarea fenomenului legăturii chimice prin tunelarea cuantică mai degrabă decât prin suprapunerea/interferența cu funcțiile de undă cuantică;
- Cercetarea unei metodologii de acoperire completă a nano-spațiului pentru structuri chimice topologice, de tip grafenic, cu reprezentarea cuanto-geometrică a impurităților de goluri nano-spațiale;
- Investigarea metodologiei nano-acoperirii prin recuperarea fenomenologiei legăturii chimice de tip cvasiparticulă cuantică ca agent de informație în nano-umpluturi, golurile potențiale trebuind tratate atât pentru structurile chimice asimetriche, cât și pentru cele simetrice extinse sau, în general, reduse topologic;
- Implementarea operației topologice de tip Capra, ce oferă pentagulația cuantică bondonică necesară, recuperând analogul nano-topologic al primitivei Wigner-Seitz în rețelele periodice;
- Stabilirea legăturii directe cu spațiul k-reciproc al vectorilor de undă și al zonelor Brillouin asociate structurilor electronice (bosonic) condensate multi-strat;
- Optimizarea metodei hidrotermale pentru obținerea de cantități necesare pentru realizarea electrodului pozitiv al bateriei pe baza de Mn prin utilizarea unei etape intermediare de agitare sub temperatura controlată, pentru a mări solubilitatea materialelor precursor;
- Eficientizarea materialelor prin utilizarea unei temperaturi de sinteză hidrotermală de 250 °C și a timpului de reacție de 48 h pentru a asigura o mai bună cristalizare și astfel o mare stabilitate a materialelor în procesul de încărcare-descărcare a ionilor de litiu;
- Materiale pentru baterii de tipul $\text{Li}_4\text{Mn}_2\text{O}_5$ - au fost determinați și optimizați parametri hidrotermali care favorizează și stabilizează faza cristalină $\text{Li}_4\text{Mn}_2\text{O}_5$, voltamograma ciclică demonstrând capacitatea acestui material de a fi folosit în dispozitivele de stocare a energiei;
- Materiale pentru baterii de tipul $\text{Li}_4\text{V}_{0.6}\text{Mn}_{1.4}\text{O}_5$ - au fost determinați și optimizați parametri hidrotermali care favorizează și stabilizează faza cristalină $\text{Li}_4\text{V}_{0.6}\text{Mn}_{1.4}\text{O}_5$, valoarea mare a potențialului de oxidare pune în evidență efectul benefic al substitutiei V de către Mn. Însa instabilitatea structurii cristaline reprezintă un dezavantaj pentru utilizarea acestui material ca și dispozitiv de stocare a energiei;
- Materiale pentru baterii de tipul $\text{Li}_4\text{Cr}_{0.6}\text{Mn}_{1.4}\text{O}_5$ - au fost determinați și optimizați parametri hidrotermali care favorizează și stabilizează faza cristalină $\text{Li}_4\text{Cr}_{0.6}\text{Mn}_{1.4}\text{O}_5$, valoarea mare a potențialului de oxidare pune în evidență efectul benefic al substitutiei Cr de către Mn. Însa instabilitatea structurii cristaline reprezintă un dezavantaj pentru utilizarea acestui material ca și dispozitiv de stocare a energiei;
- Obținerea de dispozitive integrate de generare și stocare de energie electrică, obiectivul principal al proiectului, implică ca în etapa următoare, să se realizeze proiectarea și construcția unei baterii termice, parte din dispozitivul integrat.

OBIECTIVUL PN 19 22 02. PROTECȚIA MEDIULUI ȘI TEHNOLOGII CURATE

- Depunerea materialelor de tipul LaMnO_3 nedopat și dopat cu pamnturi rare și metale de tranziție sub forma de filme subțiri pe sticla de FTO;
- Analiza structurală a filmelor obținute – din analiza spectrelor de difracție reiese că filmele subțiri obținute cu materiale perovskitice nedopate și dopate, conțin picurile aferente materialului perovskitic și sticla FTO (SnO_2); analiza Raman a evidențiat că cele mai mari intensități au fost remarcate pentru proba de LaMnO_3 dopat cu Ga, urmata în maniera descrescătoare de materialul perovskitic nedopat, Y, N, Ca, Ho, Eu și Tb;
- Dezvoltarea unui nou material hibrid pe bază de argilă de montmorillonit mineral funcționalizat cu structură de perovskit, utilizând metoda cu ultrasunete cu sonotroda imersta în mediul de reacție;
- S-a realizat caracterizarea structurală care a confirmat încorporarea cu succes a materialului perovskitic în montmorillonit; spectrele Raman obținute au confirmat prezența benzilor specifice pentru proba Mmt (296, 356, 427-456, 567, 602, 914 și 1091 cm^{-1}) și Mmt-LMO-Ag (296, 362 și 691 cm^{-1}); datorită fluorescenței, în cazul Mmt-LMO-Ag lipsesc unele dintre benzile așteptate; măsurătorile de AFM evidențiază suprafața mai compactă a eșantionului Mmt în comparație cu Mmt-LMO-Ag, având valori de rugozitate mai mici (S_a și S_q).

OBIECTIVUL PN 19 22 03. SĂNĂTATE ȘI CALITATEA VIEȚII

- Efectuarea unor studii computaționale de modelare moleculară a structurii complexelor de incluziune ciclodextrină/compuși naturali; optimizarea geometrică a complexelor și caracterizarea acestora a fost realizată cu programul Chem3D Pro, iar pentru studiile de andocare moleculară și pentru vizualizarea rezultatelor a fost utilizat programul AutoDock Vina;
- Efectuarea unor studii computaționale de modelare moleculară a structurii complexelor de incluziune ciclodextrină/compuși sintetici; s-a folosit metoda PM3 din programul HyperChem;
- Pentru compușii bioactivi studiați s-a determinat localizarea orbitalilor moleculari de frontieră (HOMO, LUMO) și au fost calculați o serie de parametri sterici importanți în studiile de andocare moleculară;
- Studiile computaționale de andocare moleculară a compușilor studiați pe molecula-țintă (ciclodextrină) au condus la evidențierea complexelor de incluziune cu cea mai mare afinitate de legare;
- Evaluarea experimentală a formării complexelor de incluziune în fază lichidă s-a realizat prin metode spectrofotometrice (metoda Job și metoda Benesi-Hildebrand) și s-a urmărit determinarea stoechiometriei de complexare gazdă-oaspete și a unor parametri termodinamici;
- Rezultatele obținute prin aplicarea metodei Job (metoda variației continue) au indicat că în urma interacțiunilor gazdă-oaspete se formează complexe de incluziune cu stoechiometria de 1:1, fapt confirmat de liniaritatea foarte bună ($R^2 > 0.99$) obținută prin aplicarea ecuației Benesi-Hildebrand pentru un complex cu stoechiometrie 1:1. Constantele de asociere (K) precum și coeficienții de extincție ($\Delta\epsilon$) ai complexelor de incluziune au fost estimate pe baza modelului de regresie liniară Benesi-Hildebrand;
- În fază solidă, compușii biologic activi (compuși cu sulf, antocianine, salicină, compuși de sinteză derivați de salicilamidă) au fost incluși în ciclodextrine naturale (α -CD, β -CD, γ -CD) și modificate (hidroxipropil- β -ciclodextrina), folosind ca metode de complexare triturarea (frământarea), co-precipitarea, metoda în sistem etanol-apă;
- Au fost urmăriti următorii parametri: raport molar optim, cantitate solvent, timp triturare/reacție, temperatură, în vederea stabilirii metodei optime de sinteză a compușilor de incluziune. Complexii obținuți în fază solidă au fost uscați până la masă constantă și păstrați în exicator până la caracterizarea acestora;
- Caracterizarea fizico-chimică a complexelor de incluziune obținuți în etapa 4 s-a realizat folosind tehnicile: spectrometrie FTIR, difracția de raze X RX, spectrofotometrie UV-VIS-NIR, microscopia electronică de baleiaj SEM și analiza termică (analiza termogravimetrică TG, analiza calorimetrică diferențială DSC);
- Spectrele FTIR au fost înregistrate cu un spectrofotometru Vertex 70 (Bruker, Germania) prin tehnica în pastilă (KBr) pe domeniul spectral 4000–400 cm^{-1} sau în modul ATR-FTIR pe domeniul 4000–650 cm^{-1} și 128 de scanări; Din analiza spectrelor FTIR s-au constatat modificări evidențiate prin dispariția unor benzi caracteristice compușilor puri în spectrele compușilor binari și prin deplasări ale benzilor de absorbție ale compușilor puri spre frecvențe diferite în spectrele complexelor de incluziune, rezultatele obținute demonstrând formarea complexelor de incluziune între compușii bioactivi și ciclodextrine;
- Caracterizarea compușilor bioactivi, a ciclodextrinelor și a complexelor lor de incluziune prin difracție de raze X s-a realizat utilizând un aparat X'Pert PRO MPD, PANalytical (Olanda). Analiza spectrelor de difracție a indicat, în cazul amestecurilor binare, o scădere a gradului de cristalinitate în comparație cu substanțele gazdă și/sau oaspete datorita fenomenului de amorfizare, respectiv o modificare a poziției și intensității picurilor de difracție. Aceste modificări atestă formarea unor noi stări solide;
- Spectrele de reflectanță/absorbantă au fost înregistrate cu un spectrofotometru UV-VIS -NIR Lambda 930, Perkin-Elmer. În general, spectrele UV-VIS-NIR arată deplasări ușoare ale maximelor de absorbție ale complexelor în comparație cu cel al componentelor gazdă și oaspete în regiunea UV. Pentru anumite amestecuri binare, diferențe spectrale semnificative s-au observat în regiunile Vis și NIR, fapt ce poate sugera formarea complexelor de incluziune;
- Analiza morfologică a suprafeței prin microscopie electronică de baleiaj SEM (Scanning Electron Microscope Inspect S, FEI, Olanda) pentru componentele pure și amestecurile binare preparate a indicat un caracter amorf mai pronunțat în cazul complexelor de incluziune;
- Analiza termogravimetrică (TG) s-a realizat utilizând un aparat NETZSCH TG 209F1 Libra, în condiții dinamice de încălzire de la 25 la 900°C cu 10°C /minut în atmosferă de azot iar analiza calorimetrică diferențială (DSC) s-a efectuat pe un aparat NETZSCH DSC 204F1 Phoenix, condiții dinamice, încălzire de la 25 la 350°C cu 10°C/minut în atmosferă de azot;

- Evaluarea compuşilor de incluziune utilizând tehnici termoanalitice arată deplasări către valori diferite de temperatură ale fenomenelor termice caracteristice celor două componente ale amestecului binar, modificări ale valorilor entalpiilor corespunzătoare fenomenelor precum și reducerea ariei picurilor lor și/sau dispariția acestora în sistemele binare, comparativ cu compuşii ca atare.

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

- Realizarea cu succes și optimizarea procedurii de fotolitografiere a unor electrozi interdigitali de Argint utilizând metoda fotorezistorului negativ;
- Obținerea unor straturi groase, conductoare electric de Argint pe substratul de cuarț monocristalin, utilizând evaporarea termică;
- Imaginea electrozilor interdigitali a fost obținută utilizând imaginea în negativ a obiectului dorit a fi fotolitografiat, respectiv metoda coroziunii chimice de realizare a imaginii în pozitiv pe substratul dorit;
- Optimizarea timpului de expunere, a diluției fotorezistorului utilizat, diluției substanței utilizate la corodarea chimică, respectiv a timpului optim de corodare chimică;
- Optimizarea aparatului de laborator ce permite formarea imaginii dorite prin iluminare Kohler;
- Obținerea electrozilor interdigitali de tipul linie de întârziere, respectiv testarea acestora prin analiză spectrală utilizând analizorul RIGOL DSA832.

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. S-au realizat: - diverse tipuri de aerogeluri pe bază de carbon și grafit funcționalizat prin metode originale care implică atât procesul liofilizării cât și procesul hidrotermal (<i>aceasta este o noutate la nivel mondial</i>); - metoda de conectare a fibrelor celulozice și de carbon obținute prin descompunerea termică a celulozei cu ajutorul nanoparticulelor anorganice de CaCO_3 și NH_4Cl ; - esantioane de probe, buletine de analiza (SEM, XRD, FT-IR, TG/DTG-ATD, UV-VIS (DSR).	Toate materialele au fost caracterizate complex prin numeroase metode cum ar fi SEM, EDX, XRD, FT-IR, TG/DTG-ATD și DSR, observându-se proprietăți interesante și utile. Aceste materiale pot fi utilizate la: - multiple aplicații de la adsorbția compuşilor toxici din apă și aer; - electrozi poroși utilizați în procesele electrochimice sau templateuri reactive pentru creșterea aerogelurilor din nanotuburi de carbon; - creșterea coeficientului de transfer termic în cadrul sistemelor de control a temperaturii varistoarelor, fiind astfel un pas suplimentar făcut pentru atingerea obiectivelor finale ale proiectului.
2. Grafentronică cu electrochimie cuantică de spin	Raport de cercetare. Modelarea reactivității chimice de spin a unui sistem auto-electrochimic pentru estimarea energiei de stocare (la fiecare astfel de ciclu electrochimic intern) în urma energiilor eliberate prin destabilizare și restabilizare electronică.	Obiectivele inițial propuse pentru aceste etape au fost îndeplinite în totalitate, fiind finalizate toate obiectivele specifice asumate în cadrul respectivelor etape ale acestui proiect.

	Metodologia de acoperire completă a nano-spațiului pentru structuri chimice topologice, de tip grafenic, cu reprezentarea cuantogeometrică a impurităților de goluri nano-spațiale.	
3. Tehnologii inovative de obtinere de dispozitive integrate de generare și stocare de energie electrica	Tehnologie hidrotermală de obtinere a materialelor de tipul $Li_4(M,Mn)_2O_5$ unde $M=V,Cr$ pentru dispozitive de stocare de energie electrica; Proiectarea, construirea și testarea unui dispozitiv de analiza a caracteristicii de incarcare/descarcare a bateriilor pe baza de Li și Mn.	Obiectivul fazei a IV-a, precum și indicatorii pentru monitorizare și evaluare au fost indepliniti în totalitate. Pe baza materialelor obtinute în etapele anterioare, în etapa din 2021 s-a realizat proiectarea, constructia, testarea și eficientizarea dispozitivelor de stocare de energie electrica; Obtinerea de dispozitive integrate de generare și stocare de energie electrica, obiectivul principal al proiectului, implica ca în etapa urmatoare să se realizeze proiectarea și constructia unei baterii termice, parte din dispozitivul integrat.
4. Nanotehnologii inovative pentru obtinerea de materiale hibride avansate cu aplicatii în protectia mediului	Filme subtiri pe baza de materiale perovskitice. Materiale hibride pe bază de montmorillonit funcționalizat cu structură perovskitica.	Obtinerea de filme subtiri pe sticla FTO. Obtinerea de noi materiale funcționalizate care să prezinte activitate electrocatalitica.
5. Complecși de incluziune supramoleculară a unor compuși naturali și de sinteză cu aplicații în sănătate	Produse noi (complecși de incluziune ai unor compuși biologic activi). Date teoretice și experimentale caracterizare complecși de incluziune	Obiectivele initial propuse pentru aceste etape au fost indeplinite în totalitate, fiind finalizate toate obiectivele specifice asumate în cadrul respectivelor etape ale acestui proiect. Faza a V-a a fost doar parțial finanțată în acest an, urmând a fi realizată integral în anul viitor de finanțare.
6. Noi tehnologii aplicate în dezvoltarea unor dispozitive de tip senzor pentru monitorizarea mediului	Realizarea prin fotolitografie a imaginii unui electrod interdigital; Realizarea utilizând metoda „spin coating” a substratului fotosensibil; Realizarea prin evaporare termica, utilizand Argintul, a substratului conductor electric; Stabilirea timpului optim de expunere, respectiv dilutia optima a fotorezistorului utilizat; Studiul influentei dilutiei substantei utilizate la corodarea chimica; Stabilirea dilutiei optime, respectiv a timpului optim de corodare chimica; Optimizarea aparaturii de laborator ce permite formarea imaginii folosind iluminarea Kohler;	Au fost realizate toate activitatile pentru atingerea obiectivului propus.

	Obținerea unor electrozi interdigitali de tipul linie de întârziere; Testarea dispozitivelor SUAS utilizând analizorul spectral RIGOL DSA832.	
--	--	--

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

Tip	Nr. 32 realizat in anul 2021
Documentații	1
Studii	4
Lucrări	25
Plan realizare	
Scheme constructive	
Altele asemenea (se vor specifica) - evenimente de mediatizare a științei și tehnologiei	2

Din care:

4.2.1. Lucrări științifice publicate în jurnale cu factor de impact relativ ne-nul (2021):

Nr.	Titlul articolului	Numele Jurnalului, Volumul, pagina nr.	Nume Autor	Anul publicării	Scorul relativ de influență al articolului	Numărul de citări ISI
1	Chemical Bonding by the Chemical Orthogonal Space of Reactivity	<i>International Journal of Molecular Sciences</i> 22, 223; DOI: 10.3390/ijms22010223	PUTZ M.V.	2021	2.127	-
2	Face colorings and chiral face colorings of icosahedral giant fullerenes: C80 to C240	<i>Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures</i> 29, 1-12; DOI: 10.1080/1536383X.2020.1794853	BALASUBRAMANIAN K., ORI O., CATALDO F., ASHRAFI A.R., PUTZ M.V.	2021	0.396	1
3	Challenging the HSAB principle on molecular machines' precursors	<i>Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures</i> 29:8, 626-637; DOI: 10.1080/1536383X.2021.1877666	DUDAȘ N.A.; ORI O., PUTZ M.V.	2021	0.396	-
4	Combinatorics of Chiral and Stereo isomers of Substituted Nanotubes: Applications of Eulerian Character Indices and Comparison with Bondonic Formalism	<i>Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures</i> 29, 00-00; DOI: 10.1080/1536383X.2021.1939310	BALASUBRAMANIAN K., ORI O., CATALDO F., PUTZ M.V.	2021	0.396	-
5	Ld/Mm+ Simulation of Some Aristolochic and Humic Acids Species Coupled in Periodic Box with Water	<i>Current Computer-Aided Drug Design</i> 17, 000-000; DOI: 10.2174/157340991666620062514 1309	PETRESCU, A.M.; PUTZ M.V.; IFRIM F.C.; ILIA, G.; PAUNESCU, V.	2021	0.228	-

6	Three-Body Excitations in Fock-Space Coupled-Cluster: Fourth Order Perturbation Correction to Electron Affinity and Its Relation to Bondonic Formalism	<i>International Journal of Molecular Sciences</i> 22, 8953; DOI: 10.3390/ijms22168953	BASUMALLICK, S.; PUTZ M.V.; PAL, S.	2021	2.127	-
7	Carbon nano-clustering introducing quantum management	<i>Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures</i> 29, 00-00; DOI: 10.1080/1536383X.2021.1964480	PUTZ M.V.; PETRIȘOR I.I.	2021	0.396	-
8	New functional hybrid materials based on clay minerals for enhanced electrocatalytic activity	<i>Journal of Alloys and Compounds</i> Volume 892, 5 February 2022, 162239	Bogdan-Ovidiu Taranu, Paulina Vlazan, Paula Svera (m. Ianasi) Maria Poienar Paula Sfirloaga	2021	5.316	-
9	Study of the structural and magnetic properties of Pd-substituted CoFe ₂ O ₄ materials obtained by a fast method	<i>Physica B-Condensed Matter</i> , Volume 615 Article Number 413073	Vlazan, P., Poienar, M., Rus, FS., Sfirloaga, P	2021	2.436	-
10	Symmetrical Antioxidant and Antibacterial Properties of Four Romanian Cruciferous Extracts	<i>Symmetry</i> , 13 (5), 893	M. Delia, M. N. Stefanut, A. Cata, V. Buda, C. Danciu, R. Banica, R. Pop, M. Licker, I.M.C. Ienascu	2021	FI=2.645 (Q2)	1
11	Development of a new "n-p" heterojunction based on TiO ₂ and CuMnO ₂ synergy materials	<i>Materials Chemistry and Physics</i> , 272 124999	Carmen Lazau, Maria Poienar, Corina Orha, Daniel Ursu, Mircea Nicolaescu, Melinda Vajda, Cornelia Bandas	2021	FI=4.094	0
12	Fabrication of a UV Photodetector Based on n-TiO ₂ /p-CuMnO ₂ Heterostructures	<i>Coatings</i> 11, 1380	Mircea Nicolaescu, Cornelia Bandas, Corina Orha, Viorel Serban, Carmen Lazău, Simona Căprărescu	2021	FI=2.881	0

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	Synthesis and characterization of three dimensional porous materials based on cellulose fibers, <i>International Conference on Applied Sciences (ICAS2021)</i> , Hunedoara, România.	C. Mosoarca, C. Pascariu, D. Ursu, C. Orha, R. Banica	2021	-
2	Graphenic heterojunction, <i>2nd international exhibition InventCor</i> , 16-18.12.2021, Deva, România.	PUTZ M.V.; BUZATU D. L.	2021	-
3	Anthocyanin extracts from different plant matrices as potential natural food dyes,	Căta A., Ienășcu I.M.C., Ștefănuț M.N.	2021	-

	<i>CHIMIA 2020 - New Trends in Applied Chemistry</i> , 27-29 mai 2021, Constanța, România.			
4	Synthesis and characterization of some N-(2-chloro-phenyl)-2-hydroxy-benzamide derivatives, <i>CHIMIA 2020 - New Trends in Applied Chemistry</i> , 27-29 mai 2021, Constanța, România.	Ienașcu I.M.C., Căta A., Moșoarcă C., Popescu I.M., Ștefănuț M.N.	2021	-
5	Glucosinolates from some Romanian species of <i>Brassicaceae</i> family, <i>CHIMIA 2020 - New Trends in Applied Chemistry</i> , 27-29 mai 2021, Constanța, România.	Ștefănuț M.N., Căta A., Vaszilcsin C., Ienașcu I.M.C.	2021	-
6	Microencapsulation of some glucosinolates from Brassica oleracea extract in β -cyclodextrin, <i>Multidisciplinary Conference on Sustainable Development, Food Chemistry, Engineering & Technology</i> , 20-21 mai 2021, Timișoara, România, p. 42.	Ștefănuț M.N., Pop R.O., Căta A., Ienașcu I.M.C.	2021	-
7	Novel inclusion complex of β -cyclodextrin and [2-(2-chlorophenylcarbonyl)-phenoxy]-acetic acid ethyl ester. The 27 th <i>International Symposium on Analytical and Environmental Problems</i> , 22-23 noiembrie 2021, Szeged, Ungaria, p. 142.	Ienașcu I.M.C., Căta A., Rusu G., Ștefănuț M.N., Sfirloagă P., Moșoarcă C., Dabici A., Ursu D.	2021	-
8	Microencapsulation of some glucosinolates from <i>Brassicafamily</i> extracts by β -cyclodextrin, The 27 th <i>International Symposium on Analytical and Environmental Problems</i> , 22-23 noiembrie 2021, Szeged, Ungaria, p. 313.	Ștefănuț M.N., Sfirloagă P., Moșoarcă C., Ursu D., Dabici A., Căta A., Ienașcu I.M.C.	2021	-
9	Obtaining and characterization of two-dimensional heterostructure layers TiO ₂ /CuMnO ₂ for sensitive application, <i>Physics Conference TIM 20</i> , Timisoara, Romania.	Carmen Lazau, Mircea Nicolaescu, Corina Orha, Cornelia Bandas	2021	-
10	The influence of different corrosion solutions on the TiO ₂ morphology obtained by thermal oxidation of Ti foils, <i>27th International Symposium on Analytical and Environmental Problems</i> , Szeged, Hungary, ISBN 978-963-306-835-9, pagina 259	Mircea Nicolaescu, Carmen Lazau, Corina Orha, Cornelia Bandas	2021	-
11	Surface acoustic wave sensors for greenhouse gas emission monitoring, <i>27th International Symposium on Analytical and Environmental Problems</i> , Szeged, Hungary, Book of Abstract, ISBN 978-963-306-835-9, pagina 112	Farkas Iuliana, Bucur Raul Alin	2021	-
12	Comparative morphostructural and electrochemical characterization of porous Ti/SnO ₂ correlated with the synthesis method, <i>27th International Symposium on Analytical and Environmental Problems</i> , Szeged, Hungary, Book of Abstract, ISBN 978-963-	Corina Orha, Mina Ionela Popescu, Cornelia Bandas, Mircea Nicolaescu, CarmenLazau, Florica Manea	2021	-

	306-835-9, pagina 161			
13	Effect of cooling rate in the Hydrothermal synthesis on crystalline structures and morphologies of bismuth ferites, <i>Physics Conference TIM 20</i> , Timisoara, Romania	Casut Cristian, Miclău Marinela, Malaescu Iosif	2021	-

4.2.3. Lucrări publicate în alte publicații relevante:

Nr.	Titlul articolului	Numele Jurnalului, Volumul, Pagina nr.	Nume Autor	Anul publicării
1	-	-	-	-
2				

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" 2021 – eveniment desfășurat on-line

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

Tip	Anul 2021
Tehnologii	1
Procedee	3
Produse informatice	
Rețele	
Formule	
Metode	6
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	2	A/00822/2021	Sfirloaga Paula, Poienar Maria, Vlazan Paulina	Procedeu de obtinere a materialelor hibride pe baza de minerale argiloase functionalizate cu structuri perovskitice
		A/00474/2021	Lazau Carmen, Nicolaescu Mircea, Bandas Cornelia, Orha Corina, Poienar Maria	Dezvoltare de senzori pe baza de heterostructuri de tipul Ti-TiO ₂ -CuMnO ₂ pentru detectia radiatiilor ultraviolete
EPO	-	-	-	-
USPTO	-	-	-	-

4.4. Structura de personal:

Personal CD (Nr.)	Anul 2021
Total personal	62
Total personal CD	62
cu studii superioare	61
cu doctorat	41
doctoranzi	14

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* 2021
1.	Albulescu Daiana	ACS		0.92	2020	1752
2.	Balcu Ionel	CSI	Director general	0.91	1997	1731
3.	Bandas Cornelia Elena	CS II		0.92	2007	1752
4.	Banica Radu	CSII		0.92	2006	1752
5.	Birdeanu (Vasile) Mihaela	CSII		0.92	2006	1752
6.	Birsan Nicolae	ACS		0.58	2015	1100
7.	Boc Ioan Daniel	CSIII		0.92	1996	1752

8.	Bucur (Ioitescu) Alexandra	CSIII		0.92	2007	1752
9.	Bucur Raul Alin	CSIII	Sef lab.	0.92	2004	1752
10.	Buzatu Doru Laurentiu	CSIII	Sef comp.	0.93	2006	1783
11.	Casut Cristian	ACS		0.92	2020	1752
12.	Cata Adina-Elena	CSIII		0.92	2006	1758
13.	Chirita Mihaila Ioan Marius	CSIII		0.92	2008	1752
14.	Dabici (Grozescu) AnaMaria	CSIII		0.92	2007	1752
15.	Dobrescu Marius Ciprian	CS		0.92	2008	1752
16.	Farkas (Badea) Iuliana	ACS		0.92	2010	1752
17.	Fitigau Firuta	CSIII		0.92	2013	1752
18.	Frigura Iliasa Flaviu	ACS	Sef comp.	0.95	2016	1808
19.	Gheorghe Damaris	ACS		0.92	2020	1752
20.	Ica Sabina Raluca	ACS		0.92	2020	1752
21.	Ianasi (Svera) Paula	CSIII		0.70	2014	1336
22.	Ienascu Ioana Maria Carmen	CSIII		0.92	2008	1758
23.	Iorga Mirela Ioana	CSIII	Sef comp.	0.94	1996	1789
24.	Ivanovici Madalina Gabriela	ACS		0.92	2020	1752
25.	Lazau Carmen	CSII	Sef lab.	0.93	2003	1780
26.	Linul Petrica	ing.		0.92	2014	1752
27.	Ladasiu -Ciolacu Flaviu	ACS		0.43	2021	830
28.	Macarie Amalia Corina	CSIII		0.90	2004	1725
29.	Marghitas Mihai-Petru	tehn.		0.92	2020	1752
30.	Miclau Marinela	CSI	Sef dept.	0.93	2001	1782
31.	Mihai Ruxandra	CSIII		0.92	2019	1752
32.	Mirica Marius Constantin	CSII	Sef dept.	0.92	1998	1752
33.	Mocanu Liviu Lucian	CS		0.92	1996	1752
34.	Mosoarca Cristina	CSIII		0.92	2006	1752
35.	Negut Catalina	CSIII		0.92	2017	1752
36.	Nicolaescu Mircea Dan	ACS		0.92	2020	1752
37.	Novaconi Stefan	CSI	Sef lab.	0.92	1996	1752
38.	Orha Ileana-Corina	CSIII		0.92	2000	1752
39.	Pandurescu Carmen	CS		0.92	1996	1752
40.	Pascariu Cosmin	ACS		0.48	2016	926
41.	Poienar Maria	CSIII		0.92	2006	1752
42.	Popescu Mina Ionela	ACS		0.92	2020	1752
43.	Putz Mihai Viorel	CSI	Sef lab.	0.95	2015	1810
44.	Racu Andrei	CS		0.92	2014	1752
45.	Rosu Dan Cristian	CSIII		0.93	1996	1772
46.	Rus Florina Stefania	CSII		0.92	2014	1752

47.	Sarbu Mirela	CS		0.92	2021	1752
48.	Sfirloaga Paula	CSI	Sef dept.	0.94	2003	1798
49.	Stancu Ionela	CSIII		0.92	2012	1752
50.	State Ramona	CSIII		0.92	2012	1752
51.	Stefanut Mariana Nela	CSII	Sef lab.	0.92	1996	1765
52.	Taranu Bogdan Ovidiu	CSIII		0.93	2008	1768
53.	Taranu Ioan	CSI	Director stiintific	0.92	1996	1758
54.	Tuchiu Bianca	ACS		0.22	2021	416
55.	Tudoran Marina Alexandra	ACS		0.93	2014	1770
56.	Urmosi Zoltan Gyula	CS	Sef comp.	0.92	2006	1758
57.	Ursu Daniel Horatiu	CSIII		0.92	2008	1762
58.	Vajda Melinda	ACS		0.92	2020	1750
59.	Van Staden Raluca Ioana	CSI	Sef lab.	0.87	2007	1672
60.	Vaszilcsin Cristian George	CSIII		0.93	2006	1783
61.	Vlazan Paulina	IDTI		0.92	1998	1752
62.	Zamfir Alina Diana	CSI		0.91	2006	1748

* 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 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	Sistem desktop PC Dell Vostro	04.11.2021	3791	PN 19 22 02 01	3791	160

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

	Nr.	Tip
Proiecte internaționale	1	Orizont 2020 WIDERA
Proiecte naționale	12	
	3	PN-III-P1-1.1-TE-2021
	7	PN-III-P2-2.1-PED-2021 ; PN-III-P2-2.1-PED-2019 (ctr.2020)
	2	PN-III-P4-PCE-2021

6. Rezultate transferate în vederea aplicării :

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

7. Alte rezultate:

- Introducerea si dezvoltarea de domenii noi de cercetare in 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 microproductii proprii;
- Atragerea tinerilor chimisti din diaspora, prin co-interesarea acestora in domenii noi de cercetare stiintifica;
- Creșterea vizibilitatii institutului pe plan national si international;
- Creșterea calitatii lucrarilor de cercetare stiintifica elaborate.

8. Aprecieri asupra derulării programului și propuneri:

Programul NUCLEU – **Tehnologii nepoluante si inovative pentru sanatate, protectia mediului si eficienta energetica / TINSME** al INCEMC Timisoara s-a derulat in conditii optime, nivelul finanțării / proiect fiind adecvat.

În cadrul prezentului Program Nucleu – **Tehnologii nepoluante si inovative pentru sanatate, protectia mediului si eficienta energetica / 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 **CNCI 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 profesionala 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 MCID în anul 2021 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.** Grafentronică cu electrochimie cuantică de spin
- **PN 19 22 01 03.** Tehnologii inovative de obtinere de dispozitive integrate de generare si stocare de energie electrica
- **PN 19 22 02 01.** Nanotehnologii inovative pentru obtinerea de materiale hibride avasate cu aplicatii in protectia 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 structurilor tridimensionale pe bază de nanofire metalice pentru fabricarea supercapacitorilor;
- Fabricarea structurilor tridimensionale pe bază de materiale anorganice (grafit) pentru realizarea varistoarelor și a membranelor;
- Obținerea aerogelurilor pe bază de grafit funcționalizat cu adaos de compozite;
- Obținerea eșantioanelor de probă, de structuri 3D (aerogeluri) pe bază de fibre celulozice și compozite, mase anorganice cu și fără adaosuri de grafit;
- Caracterizarea aerogelurilor pe bază de carbon – cu diferite adaosuri în compoziție (celuloză) în vederea îmbunătățirii rezistenței mecanice;
- Analiza morfologică și structurală a materialelor compozite;
- Caracterizarea prin realizarea de spectre XRD, imagini SEM, spectre FTIR, spectre de reflectanță difuză UV-VIS și TG;
- Modelarea reactivității chimice de spin la sistemul auto-electrochimic din faza precedentă (*Stocarea de Speța a II-a a Energiei Mașinilor Moleculare Grafenice*) pentru estimarea energiei de stocare (la fiecare astfel de ciclu electrochimic intern) în urma energiilor eliberate prin destabilizare și restabilizare electronică, în stare izolată – respectiv pe suport grafenic;
- Investigarea procesului acido-bazic pe baza principiului “Hard and Soft Acids and Bases” (HSAB), în varianta Parr-Pearson, prin care energia transferată/stocată, într-un ciclu de transformare acido-bazic, fenomen electrochimic indus, se scrie în mod aditiv (viz. principiul de superpoziție cuantică);
- Verificarea condiției de optim energetic (stocare), prin minimizarea contribuției HOMO-LUMO pe ciclul supra-molecular în raport cu tăria chimică în condițiile în care variația de electronegativitate $\Delta\chi$ și tăria chimică a contra-partenerului η_B sunt menținute constante (sunt stabilizate);
- Alcătuirea tabloului complet energetic (calculul de spectre HOMO și LUMO) pentru optimizarea cuplărilor energetice inter-bandă la funcționalizarea ciclului mașinilor moleculare cu structura de grafen, pentru depunere matriceală;
- Abordarea fenomenului legăturii chimice prin tunelarea cuantică mai degrabă decât prin suprapunerea/interferența cu funcțiile de undă cuantică;
- Cercetarea unei metodologii de acoperire completă a nano-spațiului pentru structuri chimice topologice, de tip grafenic, cu reprezentarea cuanto-geometrică a impurităților de goluri nano-spațiale;
- Investigarea metodologiei nano-acoperirii prin recuperarea fenomenologiei legăturii chimice de tip cvasiparticulă cuantică ca agent de informație în nano-umpluturi, golurile potențiale trebuind tratate atât pentru structurile chimice asimetrice, cât și pentru cele simetrice extinse sau, în general, reduse topologic;
- Implementarea operației topologice de tip Capra, ce oferă pentagulația cuantică bondonică necesară, recuperând analogul nano-topologic al primitivei Wigner-Seitz în rețelele periodice;
- Stabilirea legăturii directe cu spațiul k-reciproc al vectorilor de undă și al zonelor Brillouin asociate structurilor electronice (bosonic) condensate multi-strat;
- Optimizarea metodei hidrotermale pentru obținerea de cantități necesare pentru realizarea electrodului pozitiv al bateriei pe baza de Mn prin utilizarea unei etape intermediare de agitare sub temperatura controlată pentru a mări solubilitatea materialelor precursor;
- Eficientizarea materialelor (prin utilizarea unei temperaturi de sinteză hidrotermală de 250 °C și a timpului de reacție de 48 h) pentru a asigura o mai bună cristalizare și astfel o mare stabilitate a materialelor în procesul de încărcare-descărcare a ionilor de litiu;
- Materiale pentru baterii de tipul $\text{Li}_4\text{Mn}_2\text{O}_5$ – determinarea și optimizarea parametrilor hidrotermali care favorizează și stabilizează faza cristalină $\text{Li}_4\text{Mn}_2\text{O}_5$, voltamograma ciclică demonstrând capacitatea acestui material de a fi folosit în dispozitivele de stocare a energiei;
- Materiale pentru baterii de tipul $\text{Li}_4\text{V}_{0.6}\text{Mn}_{1.4}\text{O}_5$ - determinarea și optimizarea parametrilor hidrotermali care favorizează și stabilizează faza cristalină $\text{Li}_4\text{V}_{0.6}\text{Mn}_{1.4}\text{O}_5$, valoarea mare a potențialului de oxidare pune în

evidența efectului benefic al substituției V de către Mn; instabilitatea structurii cristaline reprezintă un dezavantaj pentru utilizarea acestui material ca și dispozitiv de stocare a energiei;

- Materiale pentru baterii de tipul $\text{Li}_4\text{Cr}_{0.6}\text{Mn}_{1.4}\text{O}_5$ - determinarea și optimizarea parametrilor hidrotermali care favorizează și stabilizează faza cristalină $\text{Li}_4\text{Cr}_{0.6}\text{Mn}_{1.4}\text{O}_5$, valoarea mare a potențialului de oxidare pune în evidența efectului benefic al substituției Cr de către Mn; instabilitatea structurii cristaline reprezintă un dezavantaj pentru utilizarea acestui material ca și dispozitiv de stocare a energiei.

OBIECTIVUL PN 19 22 02. PROTECȚIA MEDIULUI ȘI TEHNOLOGII CURATE

- Depunerea materialelor de tipul LaMnO_3 nedopat și dopat cu pamanturi rare și metale de tranziție sub forma de filme subțiri pe sticla de FTO;
- Analiza structurală a filmelor obținute – din analiza spectrelor de difracție reiese că filmele subțiri obținute cu materiale perovskitice nedopate și dopate, conțin picurile aferente materialului perovskitic și sticla FTO (SnO_2); analiza Raman a evidențiat că cele mai mari intensități au fost remarcate pentru proba de LaMnO_3 dopat cu Ga, urmata în maniera descrescătoare de materialul perovskitic nedopat, Y, N, Ca, Ho, Eu și Tb;
- Dezvoltarea unui nou material hibrid pe bază de argilă de montmorillonit mineral funcționalizat cu structură de perovskit, utilizând metoda cu ultrasunete cu sonotroda imersat în mediul de reacție;
- Realizarea caracterizării structurale care confirmă încorporarea cu succes a materialului perovskitic în montmorillonit.

OBIECTIVUL PN 19 22 03. SĂNĂTATE ȘI CALITATEA VIEȚII

- Efectuarea unor studii computaționale de modelare moleculară a structurii complexelor de incluziune ciclodextrină/compuși naturali;
- Efectuarea unor studii computaționale de modelare moleculară a structurii complexelor de incluziune ciclodextrină/compuși sintetici;
- Pentru compușii bioactivi studiați s-a determinat localizarea orbitalilor moleculari de frontieră (HOMO, LUMO) și au fost calculați o serie de parametri sterici importanți în studiile de andocare moleculară;
- Studiile computaționale de andocare moleculară a compușilor studiați pe molecula-țintă (ciclodextrină) au condus la evidențierea complexelor de incluziune cu cea mai mare afinitate de legare;
- Evaluarea experimentală a formării complexelor de incluziune în fază lichidă prin metode spectrofotometrice (metoda Job și metoda Benesi-Hildebrand) și determinarea stoechiometriei de complexare gazdă-oaspete și a unor parametri termodinamici;
- În fază solidă, compușii biologic activi (compuși cu sulf, antocianine, salicină, compuși de sinteză derivați de salicilamidă) au fost incluși în ciclodextrine naturale (α -CD, β -CD, γ -CD) și modificate (hidroxipropil- β -ciclodextrina), folosind ca metode de complexare triturarea (frământarea), co-precipitarea, metoda în sistem etanol-apă;
- Caracterizarea fizico-chimică a complexelor de incluziune obținuți prin următoarele tehnici: spectrometrie FTIR, difracție de raze X RX, spectrofotometrie UV-VIS-NIR, microscopie electronică de baleiaj SEM și analiza termică (analiza termogravimetrică TG, analiza calorimetrică diferențială DSC); rezultatele obținute au confirmat obținerea complexelor de incluziune.

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

- Realizarea cu succes și optimizarea procedurii de fotolitografiere a unor electrozi interdigitali de Argint utilizând metoda fotorezistorului negativ;
- Obținerea unor straturi groase, conductoare electrice de Argint pe substratul de cuarț monocristalin, utilizând evaporarea termică;
- Imaginea electrozilor interdigitali a fost obținută utilizând imaginea în negativ a obiectului dorit a fi fotolitografiat, respectiv metoda coroziunii chimice de realizare a imaginii în pozitiv pe substratul dorit;
- Optimizarea timpului de expunere, a diluției fotorezistorului utilizat, diluției substanței utilizate la corodarea chimică, respectiv a timpului optim de corodare chimică;
- Optimizarea aparatului de laborator ce permite formarea imaginii dorite prin iluminare Kohler;
- Obținerea electrozilor interdigitali de tipul linie de întârziere, respectiv testarea acestora prin analiza spectrală utilizând analizorul RIGOL DSA832.

În cadrul celor 6 proiecte finanțate în cursul anului 2021, 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 2021 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 6 manifestări științifice (congrese internaționale, simpozioane, seminarii, conferințe) din domeniu, cu un număr de 13 de lucrări științifice;
- au fost publicate/sunt în curs de publicare în reviste cu referenți de specialitate un număr de 12 lucrări științifice în străinătate;
- au fost depuse 2 cereri de brevet la OSIM București;
- s-au realizat prezentări la “Noaptea cercetătorilor europeni”, 24.09.2021 –Timisoara;
- 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 2021 datorate pandemiei de Covid-19, obiectivele specifice fiecărui proiect din cadrul Programului Nucleu au fost **îndeplinite** la termenul prevăzut și în bugetul aprobat, nivelul științific al acestora fiind corespunzător cerințelor.

În cadrul celor 6 proiecte selectate și finanțate în 2021, 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 2022 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.

Totodată, având în vedere faptul că datorită alocării financiare insuficiente, fazele prevăzute pentru anul 2020 nu s-au putut realiza în totalitate în 2020, fiind realizate în 2021, în acest moment există un decalaj de 1-2 etape la fiecare proiect, astfel încât proiectele nu se vor putea finaliza integral în anul 2022 cum a fost prevăzut inițial, considerăm ca fiind utilă prelungirea prezentului Program Nucleu și în anul 2023.