

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

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 anuale)

Obiectivul PN 19 22 01. *Energii regenerabile și eficiență energetică* are în vedere studiul unor aspecte privind: **(2019)** dimensionarea, proiectarea și construirea unui liofilizator de înaltă temperatură, care permite liofilizarea clasică a probelor fără necesitatea transferului lor în vacuum sau în argon din camera de liofilizare până în cuptorul de tratament termic de înaltă temperatură; realizarea unui număr de sinteze de hidroxiapatită prin precipitare și metoda hidrotermală, la diferite valori de pH, respectiv perioade diferite de timp pentru tratamentul hidrotermal; realizarea caracterizării fizico-chimice a pulberilor obținute prin diferite metode (XRD, SEM, FTIR), compararea rezultatelor și stabilirea strategiei experimentale optime pentru obținerea materialelor necesare în vederea sintezei de structuri 3D; obținerea structurilor tridimensionale poroase de hidroxiapatită din pulberi de hidroxiapatită obținute prin precipitare, respectiv prin metoda hidrotermală, cu și fără gelifiere la 2 temperaturi diferite, caracterizarea aerogelurilor prin XRD și SEM, compararea rezultatelor și stabilirea strategiei experimentale optime pentru obținerea de structuri tridimensionale poroase de calitate; depunerea matriceală a oxidului de grafen (GO)/TiO₂ pe ITO; depunerea matriceală a GO/ZnO/GO pe ITO; AFM pe distanța dintre depunerea de GO și TiO₂; rezistența electrică, tensiunea electrică, intensitatea curentului electric al materialelor depuse (matrici GO / TiO₂), respectiv (matrici GO/ZnO/GO); testarea și calibrarea răspunsurilor I-V materialelor grafentronice pe baza a 3 oxizi și 4 atomi-(Graphene-oxide∩ZnO∩TiO₂) având straturi încorporate și contacte îngropate în tranzistorul conceput cu poarta grafenică (GGT) și joncțiuni puncte cuantice-matrice în circuitul pompei de încărcare bootstrap; asamblarea și testarea tranzistorului cuantic cu porți grafenice (GGT) pe baza ansamblelor grafentronice cu 3 oxizi și 4 atomi (Graphene-oxide∩ZnO∩TiO₂) și joncțiuni matriceale pentru circuite de tip push-pull; tehnologie de obținere și materiale pentru celule solare sensibilizate cu coloranți (DSSC): nanomateriale de tipul WO₃ și Fe₂O₃ sub forma de pulberi, dar și crescute „in situ” pe placuta de wolfram și respectiv, fier; tehnologie de obținere și materiale pentru celule solare perovskitice: oxizi pe baza de cupru (CuO/Cu₂O) cu diferite dimensiuni și morfologii ca și material transportor de goluri în celula solară perovskitică și oxizi de fier (Fe₂O₃) și oxid de titan (TiO₂) cu diferite dimensiuni și morfologii ca și material transportor de electroni în celula solară perovskitică; tehnologie de obținere și materiale pentru concentratoare solare luminescente (LCS) compuși nanometrici de CuInS₂/ZnS și Y₂O₃:Er/Yb înglobați în polymethylmethacrylate (PMMA); tehnologie de obținere și materiale piezoelectrice pe baza de (K_{0.5}Na_{0.5})NbO₃ și cu structura perovskita de tipul SmBO₃, respectiv GdBO₃ (unde B= Al, Co, Cr, Fe, Mn); dezvoltarea unei tehnologii hidrotermale de obținere și materiale de tipul Li₄(M,Mn)₂O₅ unde M=V,Cr.

(2020) 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 (functionalizare 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 1H³⁺; analiza cadrului structural al unei mașini 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; 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.

(2021) 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 $\text{Li}_4\text{Cr}_{0.6}\text{Mn}_{1.4}\text{O}_5$.

(2022) dezvoltarea metodei hidrotermale simple pentru sinteza rapidă a nanostructurilor oxidice cristaline bine definite; analiza rezultatelor formării oxidilor de Fe, Mn și Co cristalini și MnO_2 ; studiu electrochimic efectuat pe suporturi de grafit modificate cu compoziții care conțin birnessit, având ca scop identificarea electrodului modificat cu cea mai mare capacitate electrică dublu strat; măsurarea valorilor capacității dublului strat, ale factorului de rugozitate și ale suprafeței electrochimic active obținute pentru electrodul modificat; realizarea mai multor tipuri de structuri poroase, inclusiv aerogeluri pe bază de grafit și argint decorate cu particule de platină; testarea electrochimică a electrozilor pentru a evidenția comportamentul acestora în reacțiile de degajare ale H_2 și O_2 ; identificarea posibilelor aplicații în construcția de celule de electroliză și pile de combustie; modificarea suprafeței compozitelor conductoare cu ajutorul unui catalizator de Pt (folosit uzual în componența pilelor de combustie), pentru a micșora suprapotențialele de degajare a H_2 , respectiv O_2 ; caracterizarea electrochimică a noilor electrozi prin tehnica voltametriei, prin înregistrarea de voltamograme ciclice și liniare; realizarea și caracterizarea unor microcircuite cuantice pe bază de grafen depus controlat, cuplate cuantic și funcționalizat în configurații matriceale (inovativ față de heterojuncțiunea transversală prezentă, cele actuale fiind tributare blocajului Coulombic și interacțiilor slabe van der Waals) cu controlul punctelor de contact; proiectarea și construirea unei baterii de stocare a energiei termice cu un design nou, pe baza de tevi independente de aluminiu umplute cu material PCM de diverse tipuri, asamblate în fascicule cu distanța constantă între ele, care permite circulația apei și utilizarea oricărui material de test, putând fi utilizate simultan până la 5 tipuri de materiale PCM cu proprietăți diferite, ceea ce permite încărcarea și descărcarea bateriei cu agenți termici de temperaturi diferite; realizarea unor amestecuri de parafină cu fire metalice (în vederea utilizării ulterioare a deșeurilor de inox, aluminiu, alama sau cupru) pentru îmbunătățirea conductivității termice a materialului compozit utilizat; testarea bateriei termice la transfer termic prin conducție.

Dezvoltarea acestor direcții conduce la rezolvarea și finalizarea următoarelor tematici:

- dimensionarea unui liofilizator de înaltă temperatură – acest tip de liofilizator permite liofilizarea substanțelor cu presiune de vapori deosebit de redusă la temperaturi scăzute deoarece există posibilitatea montării pe cuptorul GSL 1500 X a unui tub de cuarț cu flanșă pentru pompa turbomoleculară, care împreună cu capcana de vapori cu azot lichid, permite acest lucru. Astfel este posibilă liofilizarea la foarte joasă presiune a probelor sensibile dispersate în fluide neapoase cu masa moleculară ridicată, de tipul proteinelor;
- proiectarea și construirea unui liofilizator de înaltă temperatură, care permite liofilizarea clasică a probelor fără necesitatea transferului lor în vacuum sau în argon din camera de liofilizare până în cuptorul de tratament termic de înaltă temperatură; spre deosebire de liofilizatoarele comerciale, camera probei în acest tip de cuptor poate fi încălzită până la temperatura de circa 1000°C cu menținerea unui vacuum adânc, sau circa 1300 °C dacă nu se dorește decât un vacuum mediu sau tratamentul în gaz inert;
- acest tip de liofilizator permite măsurarea temperaturii în mod continuu la suprafața probei și controlul fin al acesteia prin iradierea cu pulsuri de lumină poli sau monocromatică;
- realizarea unui număr de sinteze de hidroxiapatită prin precipitare și metoda hidrotermală, la diferite valori de pH, respectiv perioade diferite de timp pentru tratamentul hidrotermal;

- realizarea caracterizării fizico-chimice a pulberilor obținute prin diferite metode (XRD, SEM, FTIR);
- compararea rezultatelor și stabilirea strategiei experimentale optime pentru obținerea materialelor necesare în vederea sintezei de structuri 3D;
- utilizarea liofilizatorului pentru a obține structuri tridimensionale poroase de hidroxiapatită – s-au utilizat pulberi de hidroxiapatită obținute prin precipitare, respectiv prin metoda hidrotermală, cu și fără gelifiere utilizând tetrabutylortosilan (TBOS); gelifierea s-a realizat la 2 temperaturi diferite, iar aerogelurile au fost caracterizate prin XRD și SEM;
- compararea rezultatelor și stabilirea strategiei experimentale optime pentru obținerea de structuri tridimensionale poroase de calitate;
- 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;
- 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;
- dezvoltarea metodei hidrotermale simple pentru sinteza rapidă a nanostructurilor oxidice cristaline bine definite;
- analiza rezultatelor formării oxizilor de Fe Mn și Co cristalini și MnO₂, unde timpul și temperatura de autoclavare au o mare influență în procesul de obținere a structurii dorite;
- studiu electrochimic efectuat pe suporturi de grafit modificate cu compoziții care conțin birnessit, având ca scop identificarea electrodului modificat cu cea mai mare capacitate electrică dublu strat - electrodul este cel modificat prin turnarea în picătură a MnO₂ și a carbonului conductor Vulcan dintr-o suspensie în etanol;
- măsurarea valorilor capacității dublu strat, ale factorului de rugozitate și ale suprafeței electrochimic active obținute pentru electrodul modificat;
- realizarea mai multor tipuri de structuri poroase, inclusiv aerogeluri pe bază de grafit și argint decorate cu particule de platină;
- testarea electrochimică a electrozilor pentru a evidenția comportamentul acestora în reacțiile de degajare ale H₂ și O₂;
- identificarea posibilelor aplicații în construcția de celule de electroliză și pile de combustie;
- modificarea suprafeței compozitelor conductoare cu ajutorul unui catalizator de Pt (folosit uzual în componența pilelor de combustie), pentru a micșora suprapotențialele de degajare a H₂, respectiv O₂;
- caracterizarea electrochimică a noilor electrozi prin tehnica voltametriei, prin înregistrarea de voltamograme ciclice și liniare;
- depunerea matriceală a oxidului de grafen (GO)/TiO₂ pe ITO;
- AFM – realizat pe distanța dintre depunerea de GO și TiO₂;
- rezistența electrică, tensiunea electrică, intensitatea curentului electric al materialelor depuse (matrici GO/TiO₂);
- depunerea matriceală a GO/ZnO/GO pe ITO;
- rezistența electrică, tensiunea electrică, intensitatea curentului electric ale materialelor depuse (matrici GO/ZnO/GO);
- testarea și calibrarea răspunsurilor I-V materialelor grafentronice pe baza a 3 oxizi și 4 atomi-(Graphene-oxide∩ZnO∩TiO₂) având straturi încorporate și contacte îngropate în tranzistorul conceput cu poarta grafenică (GGT) și joncțiuni puncte cuantice-matrice în circuitul pompei de încărcare bootstrap;
- asamblarea și testarea tranzistorului cuantic cu porți grafenice (GGT) pe baza ansamblelor grafentronice cu 3 oxizi și 4 atomi (Graphene-oxide∩ZnO∩TiO₂) și joncțiuni matriceale pentru circuite de tip push-pull;
- avansarea (pentru prima dată după cunoștințele noastre) unui criteriu eminentemente 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 (functionalizare cu grafen sau precursori ai acestuia în fazele ulterioare ale proiectului).
- avansarea unui 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;
- studiul aplicativ al structurii de lucru a sistemului MM de tipul [2]rotaxanului $1H^{3+}$ (cu componentele: macrociclu 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;
- 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 interblocaută 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 mașina 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;
- realizarea și caracterizarea unor microcircuite cuantice pe bază de grafen depus controlat, cuplate cuantic și funcționalizat în configurații matriceale (inovativ față de heterojoncțiunea transversală prezentă, cele actuale fiind tributare blocajului Coulombic și interacțiilor slabe van der Waals) cu controlul punctelor de contact;
- realizarea unei tehnologii de obținere de materiale pentru celule solare sensibilizate cu coloranți (DSSC): nanomateriale de tipul WO_3 și Fe_2O_3 sub forma de pulveri, dar și crescute „in situ” pe placuta de wolfram și respectiv, fier;
- realizarea unei tehnologii de obținere de materiale pentru celule solare perovskitice: oxizi pe baza de cupru (CuO/Cu_2O) cu diferite dimensiuni și morfologii ca și material transportor de goluri în celula solara perovskitica și oxizi de fier (Fe_2O_3) și oxid de titan (TiO_2) cu diferite dimensiuni și morfologii ca și material transportor de de electroni în celula solara perovskitica;

- realizarea unei tehnologii de obtinere de materiale pentru concentratoare solare luminescente (LCS) compuși nanometrici de $\text{CuInS}_2/\text{ZnS}$ si $\text{Y}_2\text{O}_3:\text{Er}/\text{Yb}$ înglobați în polymethylmethacrylate (PMMA);
- realizarea unei tehnologii de obtinere de materiale piezoelectrice pe baza de $(\text{K}_{0.5}\text{Na}_{0.5})\text{NbO}_3$ si cu structura perovskita de tipul SmBO_3 , respectiv GdBO_3 (unde $B = \text{Al}, \text{Co}, \text{Cr}, \text{Fe}, \text{Mn}$);
- dezvoltarea unei tehnologii hidrotermale de obtinere a materialelor de tipul $\text{Li}_4(\text{M},\text{Mn})_2\text{O}_5$ unde $M = \text{V}, \text{Cr}$;
- obținerea unor materiale pentru celule solare sensibilizate cu coloranti (DSSC): nanomateriale de tipul WO_3 si Fe_2O_3 sub forma de pulberi, dar si crescute „ in situ” pe placuta de wolfram si respectiv, fier;
- obținerea unor materiale pentru celule solare perovskitice: oxizi pe baza de cupru ($\text{CuO}/\text{Cu}_2\text{O}$) cu diferite dimensiuni si morfologii ca si material transportor de goluri in celula solara perovskitica si oxizi de fier (Fe_2O_3) si oxid de titan (TiO_2) cu diferite dimensiuni si morfologii ca si material transportor de de electroni in celula solara perovskitica;
- obținerea unor materiale pentru concentratoare solare luminescente (LCS) compuși nanometrici de $\text{CuInS}_2/\text{ZnS}$ si $\text{Y}_2\text{O}_3:\text{Er}/\text{Yb}$ înglobați în polymethylmethacrylate (PMMA);
- obținerea unor materiale piezoelectrice pe baza de $(\text{K}_{0.5}\text{Na}_{0.5})\text{NbO}_3$ si cu structura perovskita de tipul SmBO_3 , respectiv GdBO_3 (unde $B = \text{Al}, \text{Co}, \text{Cr}, \text{Fe}, \text{Mn}$);
- obținerea unor materiale de tipul $\text{Li}_4(\text{M},\text{Mn})_2\text{O}_5$, unde $M = \text{V}, \text{Cr}$, cu diferite morfologii si dimensiuni.
- proiectarea, constructia, testarea si eficientizarea dispozitivelor de generare de energie electrica;
- optimizarea filmelor de oxid de fier pe placute de fier ca si fotoanod al celulelor solare sensibilizate cu colorant organic de tip n (DSSC);
- proiectarea, constructia, testarea si eficientizarea dispozitivelor de generare de energie electrica;
- 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 ($\text{CuO}/\text{Cu}_2\text{O}$) si oxizi de fier (Fe_2O_3) sau oxid de titan (TiO_2);
- proiectarea, constructia, testarea si eficientizarea unui generator piezoelectric de energie electrica.
- proiectarea, constructia, testarea si eficientizarea dispozitivelor de stocare de energie electrica;
- optimizarea metodei hidrotermale pentru obtinerea de cantitati necesare pentru realizarea electrodului pozitiv al bateriei pe baza de Mn prin utilizarea unei etape intermediare de agitare sub temperatura controlata, pentru a mari solubilitatea materialelor precursor;
- eficientizarea materialelor prin utilizarea unei temperaturi de sinteza hidrotermala de $250\text{ }^\circ\text{C}$ si a timpului de reactie de 48 h pentru a asigura o mai buna cristalizare si astfel o mare stabilitate a materialelor in procesul de incarcare descarcare a ionilor de litiu;
- obținerea materialelor pentru baterii de tipul $\text{Li}_4\text{Mn}_2\text{O}_5$;
- determinarea si optimizarea parametrilor hidrotermali care favorizeaza si stabilizeaza faza cristalina $\text{Li}_4\text{Mn}_2\text{O}_5$, voltamograma ciclica demonstrand capacitatea acestui material de a fi folosit in 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 si optimizarea parametrilor hidrotermali care favorizeaza si stabilizeaza faza cristalina $\text{Li}_4\text{V}_{0.6}\text{Mn}_{1.4}\text{O}_5$, valoarea mare a potentialului de oxidare pune in evidenta efectul benefic al substitutiei V de catre Mn; instabilitatea structurii cristaline reprezinta un dezavantaj pentru utilizarea acestui material ca si 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 si optimizarea parametrilor hidrotermali care favorizeaza si stabilizeaza faza cristalina $\text{Li}_4\text{Cr}_{0.6}\text{Mn}_{1.4}\text{O}_5$, valoarea mare a potentialului de oxidare pune in evidenta efectul benefic al substitutiei Cr de catre Mn; instabilitatea structurii cristaline reprezinta un dezavantaj pentru utilizarea acestui material ca si dispozitiv de stocare a energiei;
- obtinerea de dispozitive integrate de generare si stocare de energie electrica, obiectivul principal al proiectului, implica ca in etapa urmatoare, sa se realizeze proiectarea si constructia unei baterii termice, parte din dispozitivul integrat;
- proiectarea si construirea unei baterii de stocare a energiei termice cu un designul nou, pe baza de tevi independente de aluminiu umplute cu material PCM de diverse tipuri, asamblate in fascicule cu distanta

constanta între ele, care permite circulația apei și utilizarea oricărui material de test, putând fi utilizate simultan până la 5 tipuri de materiale PCM cu proprietăți diferite, ceea ce permite încărcarea și descărcarea bateriei cu agenți termici de temperaturi diferite;

- realizarea unor amestecuri de parafină cu fire metalice (În vederea utilizării ulterioare a deșeurilor de inox, aluminiu, alama sau cupru) pentru îmbunătățirea conductivității termice a materialului compozit utilizat;
- testarea bateriei termice la transfer termic prin conducție.
- 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 perioada 2019-2022, au fost abordate următoarele proiecte:

- **PN 19 22 01 01. Tehnologii avansate pentru materiale dedicate sectoarelor energetice.** Acesta a avut în componența lui etapele:
 - Proiectarea și construcția unei instalații pentru sinteza materialelor tridimensionale microporoase
 - Materiale tridimensionale microporoase pe bază de hidroxiapatită - parțial
 - Materiale tridimensionale microporoase pe bază de hidroxiapatită – final
 - Structuri tridimensionale microporoase metalice
 - Sinteza unor materiale poroase pe bază de grafit funcționalizat pentru aplicații în supercapacitori
 - Materiale cu comportament pseudo-capacitiv și densități mari de putere pentru stocarea eficientă a energiei
 - Electrocatalizatori poroși pentru aplicații în celule de electroliză și pile de combustie – parțial
 - Electrocatalizatori poroși pentru aplicații în celule de electroliză și pile de combustie – final

În etapele derulate în anul 2019 s-au realizat următoarele activități:

- Dimensionarea unui liofilizator de înaltă temperatură;
- Proiectarea și construirea unui liofilizator de înaltă temperatură;
- Particule de hidroxiapatită cu factor de formă ridicat - Spectre de raze X; Imagini de microscopie electronică de scanare; Spectre în infraroșu; Curbe termogravimetrice;
- Structuri tridimensionale poroase de hidroxiapatită - spectre de raze X; imagini de microscopie electronică de baleiaj.

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 compresie - rezistența electrică pentru materiale hibride.

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.

În etapele derulate în anul 2022 s-au realizat următoarele activități:

- Obținerea unei tehnologii de realizare a unor materiale cu densitate de stocare mare a energiei.
- Elaborarea protocoalelor de obținere și caracterizare a materialelor de tipul $MxOy$ și $Mx-zDzOy$ (unde M-metal, D-dopant, O-oxigen) precum protocoale pentru repararea compușilor diferite metode chimice și a celor de obținere a straturilor. Protocol de lucru privind stabilirea condițiilor optime pentru optimizarea straturilor oxidice pentru evaluarea comportamentului capacitiv.
- Decorarea aerogelurilor pe bază de grafit și argint cu nanoparticule de platină.

- Studii de voltametrie ciclică pe electrozii poroși decorați și nedecorați cu particule de platină și alți catalizatori specifici pentru reacțiile de reducere și oxidare.

➤ **PN 19 22 01 02. Grafentronică cu electrochimie cuantică de spin.** Acesta a avut în componența lui etapele:

- Inginerie Grafentronică. Algebra Electronică pe Grafen - partial
- Inginerie Grafentronică. Algebra Electronică pe Grafen - final
- Inginerie Grafentronică. Heterojoncțiuni Grafenice Matriceale
- 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
- 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
- Electrochimia Cuantică cu Grafen. Metrologie Cuantică Electrochimică
-

În etapele derulate în anul 2019 s-au realizat următoarele activități:

- Modelarea și observarea experimentală a supra-curentului electric "verde" (pe suport grafenic) cu ajutorul grafentronicii, prin configurații inovative de heterojoncțiuni matriceale (Oxid de Grafen/GO, în combinație cu Oxid de Titan TiO₂, respectiv de Zinc/ZnO);
- Proiectarea joncțiunilor matriceale de tip grafentronic cu 3 oxizi-4 atomi (Graphene-oxide GO∩ZnO∩TiO₂) prin combinații inteligente cu efecte cuantice asupra îmbunătățirii transportului informațional cuantic folosind tranzistoarele cu porți grafenice obținute (GGT), înlocuind astfel tehnologia pe bază de siliciu (Silicon Gate Transistors) și a efectului aliat MOSFET (*metal-oxide-semiconductor field-effect transistors*) prin versiunea prezentată GFET (*graphene-based field effect transistor*).

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 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;
- 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 macrociclul 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 (A₁²⁺) și o unitate 3,3'-dimetil-4,4'-bipiridină (A₂²⁺), care joacă rolul "stațiilor" pentru inel; un fotosenzitivator tip [Ru(bpy)₃]²⁺ (bpy, 2,2'-bipiridină) la transferul de electroni (P²⁺) 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.

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.

În etapa derulată în anul 2022 s-au realizat următoarele activități:

- Proiectarea semiconductorului-grafen (SG) matriceal în heterojoncțiuni cu conductivitate controlată.
- Investigarea proprietățile electrice ale sistemului de matrici în heterojoncțiuni GO / ZnO (TiO₂) depuse pe sticla ITO.
- Proiectarea/Optimizarea ZnO (TiO₂)/GO (oxid de grafen) ca nano-puncte depozitate pe configurații de tip 3Qubit cu dispunere de joncțiuni-matriceale.
- Activarea așa numitelor porți hamiltoniene cuantice.

➤ **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:

- Sinteza, caracterizarea si optimizarea materialelor folosite in generarea energiei electrice prin conversia energiei solare si mecanice
- Sinteza, caracterizarea si optimizarea materialelor folosite in stocarea energiei electrice
- Proiectarea, constructia, testarea si eficientizarea dispozitivelor de generare de energie electrica - partial
- Proiectarea, constructia, testarea si eficientizarea dispozitivelor de generare de energie electrica - final
- Proiectarea, constructia, testarea si eficientizarea dispozitivelor de stocare de energie electrica
- Proiectarea si constructia unei baterii termice

În etapele derulate în anul 2019 s-au realizat următoarele activități:

- Materiale - nanomateriale cu morfologii diferite de tipul WO₃ si Fe₂O₃ sub forma de pulberi, dar si crescute „in situ” pe placuta de wolfram si respectiv, fier;
- Oxizi pe baza de cupru (CuO/Cu₂O)cu diferite dimensiuni si morfologii ca si material transportor de goluri in celula solara perovskitica;
- Oxizi de fier (Fe₂O₃) si oxid de titan (TiO₂) cu diferite dimensiuni si morfologii ca si material transportor de de electroni in celula solara perovskitica;
- Compuși nanometrici de CuInS₂/ZnS înglobați în polymethylmethacrylate (PMMA);
- Compuși Y₂O₃:Er/Yb înglobați în polymethylmethacrylate (PMMA);
- Ceramici piezoelectrice pe baza de (K_{0.5}Na_{0.5})NbO₃;
- Ceramici piezoelectrice cu structura perovskita de tipul SmBO₃, respectiv GdBO₃ (unde B= Al, Co, Cr, Fe, Mn);

- Obținerea, caracterizarea și optimizarea nanomaterialelor de tipul $\text{Li}_4(\text{M},\text{Mn})_2\text{O}_5$, unde $\text{M}=\text{V},\text{Cr}$, folosite în stocarea energiei electrice.

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

- Obținerea prin metoda hidrotermală și caracterizarea filmelor de oxid de fier pe placută metalică de fier;
- Construirea și caracterizarea celulelor solare sensibilizate cu colorant (DSSC-uri) pe baza oxizilor de fier folosind coloranți și electroliti organici.
- Proiectarea, construcția, testarea și eficientizarea celulelor solare sensibilizate cu colorant (DSSC-uri) folosind coloranți și electroliti organici.
 - 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 ($\text{CuO}/\text{Cu}_2\text{O}$) și oxizi de fier (Fe_2O_3) sau oxid de titan (TiO_2)
- Proiectarea, construcția, testarea și eficientizarea unui generator piezoelectric de energie electrică.

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

- Optimizarea materialelor de tipul $\text{Li}_4(\text{M},\text{Mn})_2\text{O}_5$ unde $\text{M}=\text{V},\text{Cr}$ pe baza voltametriei ciclice;
- Proiectarea, construirea și testarea unui dispozitiv de analiză a caracteristicii de încărcare/descărcare a bateriilor pe baza de Li și Mn.

În etapele derulate în anul 2022 s-au realizat următoarele activități:

- Construcția și testarea funcționării unei baterii de stocare a energiei termice utilizând materiale cu transformare de fază.
- Stabilirea factorilor tehnologici și economici de care trebuie să se țină cont pentru construcția bateriei de stocare a energiei.
- Proiectarea bateriei termice.
- Construcția diverselor părți constituente ale bateriei termice.
- Testarea funcționării.
- Brevetarea bateriei de stocare, în cazul în care aceasta conține elemente de noutate.

Obiectivul PN 19 22 02. Protecția mediului și tehnologii curate are în vedere studiul unor aspecte privind:

(2019) materiale perovskitice de LaMnO_3 dopate care să prezinte proprietăți selective; sinteza materialelor de LaMnO_3 dopate (Ag sau Ti) prin metoda ultrasonică cu sonotrodă imersată în mediu de reacție și metoda sol-gel; caracterizarea fizico-chimică a materialelor obținute.

(2020) 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, cât și comportamentul electrochimic al acestora în prezență ferocianurii 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 perovskiți cu cele mai bune proprietăți electrocatalitice pentru reacția de degajare a oxigenului, de reducere a hidrogenului, respectiv de oxidare a azotitului.

(2021) depunerea de filme subțiri pe sticlă de FTO de material de tipul LaMnO_3 nedopat și dopat cu pamanturi rare și metale de tranziție; caracterizarea fizico-chimică a filmelor subțiri; funcționalizarea materialelor perovskitice pe baza de LaMnO_3 dopat cu Ag; analiză morfo-structurală a materialelor hibride obținute; analiză parametrilor texturali.

(2022) obținerea de filme subțiri (material hibrid pe baza de montmorillonite funcționalizat cu materiale perovskitice obținute prin metoda solid-solid), cu ajutorul metodei spin-coating; caracterizarea filmelor subțiri prin microscopie de forță atomică și microscopie confocală (pentru a pune în evidență uniformitatea stratului); studiul proprietăților electrice ale filmelor obținute prin determinarea potențialului benzii plate (flat-banda potential), obținut cu ajutorul metodei Mott-Schottky; realizarea depunerii filmelor cu metoda spin-coating.

Dezvoltarea acestor direcții conduce la rezolvarea și finalizarea următoarelor tematici:

- sinteza și caracterizarea materialelor perovskitice dopate prin procedee ecologice și la cost scăzut;
- analiza fizico-chimică a materialelor obținute;
- caracterizarea morfo-structurală a materialelor obținute;
- realizarea de electrozi modificați cu material perovskitic;
- 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, cât 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.
- depunerea materialului de tipul LaMnO_3 nedopat și dopat cu pamanturi 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;
- obținerea de filme subțiri (material hibrid pe baza de montmorillonite funcționalizat cu materiale perovskitice obținute prin metoda solid-solid), cu ajutorul metodei spin-coating.
- Caracterizarea acestora prin microscopie de forță atomică și microscopie confocală (pentru a pune în evidență uniformitatea stratului).
- studiul proprietăților electrice ale filmelor obținute prin determinarea potențialului benzii plate (flat-banda potential), obținut cu ajutorul metodei Mott-Schottky.
- depunerea filmelor a fost realizată cu ajutorul metodei spin-coating.
- 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 perioada 2019-2022, a fost abordat următorul proiect:

- **PN 19 22 02 01. Nanotehnologii inovative pentru obținerea de materiale hibride avasate cu aplicații în protecția mediului.** Acesta a avut în componența lui etapele:
 - Obținerea de materiale de tip perovskitic dopate cu ioni metalici
 - Caracterizarea morfo-structurală a materialelor obținute. Realizarea de electrozi modificați cu materiale perovskitice – parțial
 - Caracterizarea morfo-structurală a materialelor obținute. Realizarea de electrozi modificați cu materiale perovskitice - final
 - Testarea activității electrocatalitice a electrozilor pe baza de compuși perovskitici
 - Obținerea de filme subțiri modificate cu compuși perovskitici
 - Funcționalizarea materialelor perovskitice cu montmorilonit – parțial

- Funcționalizarea materialelor perovskitice cu montmorilonit - final
- Obținerea de filme subțiri modificate cu material hibride
- Testarea activității electrocatalitice a electrozilor modificați cu heterostructuri hibride

În etapele derulate în anul 2019 s-au realizat următoarele activități:

- Materiale perovskitice de LaMnO_3 dopate care să prezinte proprietăți selective;
- Sinteza materialelor de LaMnO_3 dopate (Ag sau Ti) prin metoda ultrasonica cu sonotroda imersată în mediu de reacție și metoda sol-gel;
- Caracterizarea fizico-chimică a materialelor obținute.

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

- Modificarea electrozilor cu compuși 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.

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.

În etapele derulate în anul 2022 s-au realizat următoarele activități:

- Obținerea de filme subțiri utilizând materiale hibride (materiale perovskitice funcționalizate cu montmorillonite);
- Caracterizarea fizico-chimică a materialelor obținute prin: microscopie confocală, microscopie de forță atomică;
- Testarea proprietăților electrice.

Obiectivul PN 19 22 03. Sănătate și calitatea vieții are în vedere studiul unor aspecte privind:

(2019) realizarea unor extracții de compuși naturali bioactivi din matrici vegetale autohtone; testarea metodelor clasice (agitare, macerare, extracție sub presiune) și a metodelor moderne de extracție (extracții în câmp cu ultrasunete și în câmp cu microunde); caracterizarea extractelor din varză, broccoli acclimatizat, semințe de rapiță, usturoi și ceapă românești, prin trasarea spectrelor UV-Vis, determinarea activității antioxidante prin două metode: DPPH și FRAP și determinarea conținutului total de fenoli; extracția antocianinelor din fructe, legume și flori indigene (ceapă roșie, ridichi roșii, cireșe, dode negre, mac și bujor); caracterizarea extractelor prin trasarea spectrelor de absorbție UV-Vis și determinarea conținutului total de antocianine; teste pentru extracția și izolarea salicinei din coaja de salcie; obținerea salicinei a fost confirmată prin determinarea punctului de topire, difracție de raze X și analiză cromatografică; sinteza unor compuși sintetici biologic activi: obținerea a 3 serii de compuși, derivați ai 5-clorsalicilamidei, N-(2-clor-fenil)-2-hidroxi-benzamidei și N-(4-clor-fenil)-2-hidroxi-benzamidei, atât prin sinteză clasică, cât și prin iradiere cu microunde.

(2020) 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 ¹³C-RMN, UV-Vis, determinări de total fenoli, activități antioxidante, etc.).

(2021) obținerea în fază lichidă și solidă a complexelor ciclodextrină/compuși naturali și a complexelor 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 complexelor de incluziune cu cea mai mare afinitate de legare; formarea complexelor de incluziune în fază lichidă - spectrofotometric; includerea în ciclodextrine a compușilor biologic activi studiați (în fază solidă); caracterizarea parțială a complexelor în fază solidă ciclodextrină/compuși naturali și a complexelor ciclodextrină/compuși sintetici; caracterizarea fizico-chimică a complexelor de incluziune obținuți.

(2022) finalizarea caracterizării complexelor în fază solidă ciclodextrine/compuși naturali și ciclodextrine/compuși sintetici; caracterizarea fizico-chimică a complexelor de incluziune *prin*: spectrometrie FTIR și Raman, difracția de raze X RX, spectrofotometrie UV-VIS-NIR, microscopia electronică de baleiaj SEM și analiză termică (analiza termogravimetrică TG, analiza calorimetrică diferențială DSC); confirmarea formării complexelor de incluziune ai ciclodextrinelor (α -ciclodextrină, β -ciclodextrină, γ -ciclodextrină, 2-hidroxi-propil- β -ciclodextrină) cu extractele naturale obținute, salicină și derivații hidroxibenzamidici sintetizați; evaluarea activităților antimicrobiene a compușilor bioactivi studiați și a complexelor de incluziune în ciclodextrine pe tulpini microbiene de referință (*Streptococcus mutans* ATCC 35668, *Streptococcus pyogenes* ATCC 19615, *Staphylococcus aureus* ATCC 25923, *Escherichia coli* ATCC 25922, *Pseudomonas aeruginosa* ATCC 27853, *Candida albicans* ATCC 10231) și/sau pe tulpini izolate clinic (*Staphylococcus aureus*, *Enterococcus faecalis*, *Streptococcus agalactiae*, *Bacillus cereus*, *Escherichia coli*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Candida parapsilosis*, *Candida albicans*).

Dezvoltarea acestor direcții conduce la rezolvarea și finalizarea următoarelor tematici:

- realizarea unor extracții de compuși naturali bioactivi din matrici vegetale autohtone;
- testarea metodelor clasice (agitare, macerare, extracție sub presiune) și a metodelor moderne de extracție (extracții în câmp cu ultrasunete și în câmp cu microunde) și au fost folosiți mai mulți solvenți, de diferite polarități (apă, etanol, metanol, acetonitril, CH₂Cl₂).
- caracterizarea extractelor din varză, broccoli aclimatizat, semințe de rapiță, usturoi și ceapă românești, prin trasarea spectrelor UV-Vis, determinarea activității antioxidante prin două metode: DPPH și FRAP și determinarea conținutului total de fenoli.
- extracția antocianinelor, o categorie de compuși biologic activi cu o largă aplicabilitate în medicină, farmacie și industria alimentară, din fructe, legume și flori indigene (ceapă roșie, ridichi roșii, cireșe, duche negre, mac și bujor).
- caracterizarea extractelor prin trasarea spectrelor de absorbție UV-Vis și determinarea conținutului total de antocianine;
- teste pentru extracția și izolarea salicinei din coaja de salcie; obținerea salicinei a fost confirmată prin determinarea punctului de topire, difracție de raze X și analiză cromatografică.
- sinteza unor compuși sintetici biologic activi: obținerea a 3 serii de compuși, derivați ai 5-clorsalicilamidei, N-(2-clor-fenil)-2-hidroxi-benzamidei și N-(4-clor-fenil)-2-hidroxi-benzamidei, atât prin sinteză clasică, cât și prin iradiere cu microunde;
- derivații de 5-clor-salicilamidă au avut ca substanță de pornire salicilamida, iar celelalte două serii au fost obținute pornind de la acid salicilic. Folosind încălzirea convențională, cu excepția [2-(2-clor-fenilcarbamoil)-fenoxi]-acetatului de metil ($\eta=35\%$), compușii au fost obținuți cu randamente bune (59-96%), timpul de reacție este cuprins între 3 și 5 ore, iar purificarea a presupus doar recristalizarea dintr-un solvent adecvat (etanol, dimetilformamidă);
- anilidele acidului salicilic pot fi obținute pornind de la acidul salicilic substituit corespunzător și amine aromatice cu grupe atrăgătoare de electroni (-X, -NO₂) sau donoare de electroni (-R sau R-CO-), în prezență de PCl₃ utilizând iradierea cu microunde, în prezență de solvent, folosind un cuptor cu microunde;
- esterii etilici/metilici ai salicilamidei/anilidei se pot obține având ca substanțe de plecare salicilanilida substituită corespunzător și esteri metilici/etilici halogenați (cloroacetat de etil/metil);
- 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 ¹³C-RMN, UV-Vis, determinări de total fenoli, activități antioxidante, etc.).
- obținerea în fază lichidă și solidă a complexelor ciclodextrină/compuși naturali și a complexelor 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 complexelor de incluziune cu cea mai mare afinitate de legare;
- formarea complexelor 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 complexelor în fază solidă ciclodextrină/compuși naturali și a complexelor ciclodextrină/compuși sintetici;
- caracterizarea fizico-chimică a complexelor 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 complexelor de incluziune.
- caracterizarea complexelor în fază solidă ciclodextrine/compuși naturali și ciclodextrine/compuși sintetici;
- caracterizarea fizico-chimică a complexelor de incluziune s-a realizat folosind tehnicile: spectrometrie FTIR și Raman, difracția de raze X RX, spectrofotometrie UV-VIS-NIR, microscopia electronică de baleiaj SEM și analiză termică (analiza termogravimetrică TG, analiza calorimetrică diferențială DSC);
- confirmarea formării complexelor de incluziune ai ciclodextrinelor (α -ciclodextrină, β -ciclodextrină, γ -ciclodextrină, 2-hidroxi-propil- β -ciclodextrină) cu extractele naturale obținute, salicină și derivații hidroxibenzamidici sintetizați;
- evaluarea activităților antimicrobiene a compușilor bioactivi studiați și a complexelor de incluziune în ciclodextrine pe tulpini microbiene de referință (*Streptococcus mutans* ATCC 35668, *Streptococcus pyogenes* ATCC 19615, *Staphylococcus aureus* ATCC 25923, *Escherichia coli* ATCC 25922, *Pseudomonas aeruginosa* ATCC 27853, *Candida albicans* ATCC 10231) și/sau pe tulpini izolate clinic (*Staphylococcus aureus*, *Enterococcus faecalis*, *Streptococcus agalactiae*, *Bacillus cereus*, *Escherichia coli*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Candida parapsilosis*, *Candida albicans*);
- complexii obținuți cu derivați de salicilanilide cloro-substituiți au demonstrat activitate antibacteriană bună asupra unor tulpini bacteriene Gram-pozitive (*Streptococcus mutans* ATCC 35668, *Streptococcus pyogenes* ATCC 19615, *Staphylococcus aureus* ATCC 25923);
- 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 perioada 2019-2022, 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:
 - Extracția compușilor naturali bioactivi din matrici vegetale autohtone
 - Sinteze chimice de compuși bioactivi, derivați ai acidului salicilic
 - Caracterizarea compușilor bioactivi naturali și sintetici prin tehnici moderne de analiză
 - Obținerea complexelor de incluziune ciclodextrine-compuși naturali și de sinteză în fază lichidă și solidă
 - Caracterizarea compușilor de incluziune obținuți - parțial
 - Caracterizarea compușilor de incluziune obținuți - final
 - Testarea activității antimicrobiene a compușilor bioactivi și a complexelor de incluziune în ciclodextrine – parțial
 - Testarea activității antimicrobiene a compușilor bioactivi și a complexelor de incluziune în ciclodextrine - parțial 2

În etapele derulate în anul 2019 s-au realizat următoarele activități:

- Obținerea extractelor de compuși naturali din matrici autohtone prin diverse metode: extracția clasică (decoct, macerare, extracție sub agitare, extracție sub presiune), în câmp ultrasonor, în câmp cu microunde; testarea unor solvenți de extracție: apă, alcoolii inferiori, acetonitril;
- Obținerea unor compuși noi biologic activi derivați ai acidului salicilic: anilide, esteri, hidrazide și hidrazone.

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 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).

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 complexșilor de incluziune cu cea mai mare afinitate de legare;
- Evaluarea spectrofotometrică a formării complexșilor 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 complexșilor în fază solidă ciclodextrină/compuși naturali și a complexșilor ciclodextrină/compuși sintetici;
- Caracterizarea fizico-chimică a complexșilor 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).

În etapa derulată în anul 2022 s-au realizat următoarele activități:

- Finalizarea caracterizării complexșilor în fază solidă ciclodextrine/compuși naturali și ciclodextrine/compuși sintetici prin tehnicile: spectrometrie FTIR și Raman, difracția de raze X RX, spectrofotometrie UV-VIS-NIR, microscopia electronică de baleiaj SEM și analiză termică (analiza termogravimetrică TG, analiza calorimetrică diferențială DSC).
- Cercetări experimentale privind evaluarea activităților antimicrobiene a compușilor bioactivi studiați și a complexșilor de incluziune în ciclodextrine pe tulpini microbiene de referință (*Streptococcus mutans* ATCC 35668, *Streptococcus pyogenes* ATCC 19615, *Staphylococcus aureus* ATCC 25923, *Escherichia coli* ATCC 25922, *Pseudomonas aeruginosa* ATCC 27853, *Candida albicans* ATCC 10231) și/sau pe tulpini izolate clinic (*Staphylococcus aureus*, *Enterococcus faecalis*, *Streptococcus agalactiae*, *Bacillus cereus*, *Escherichia coli*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Candida parapsilosis*, *Candida albicans*).
- Demonstrarea rolului benefic al complexării asupra eficienței derivaților de salicilanilide cloro-substituiți noi, pornind de la premisa că captarea compușilor antimicrobieni în ciclodextrine ar trebui să conducă la un control adecvat al eliberării medicamentului, astfel încât medicamentele să poată fi folosit mai eficient.

Obiectivul PN 19 22 04. Tehnologii avansate (electrochimice / chimice / nanotehnologii) are în vedere studiul unor aspecte privind:

(2019) realizarea sintezelor de laborator în vederea obținerii ceramicilor piezoelectrice de tipul $(\text{K,Na})\text{NbO}_3$ prin reacție în fază solidă; obținerea ceramicilor piezoelectrice pe baza de $(\text{K,Na})\text{NbO}_3$ dopate cu $x\text{mol } \% \text{ SmBO}_3$, respectiv GdBO_3 (unde $B = \text{Al, Co, Cr, Fe, Mn}$), unde $x = 0.25, 0.5, 0.75, 1, 2.5, 5$, prin reacție în fază solidă; studiul proprietăților piezoelectrice, dielectrice și mecanice prin metode specifice; studiul difractogramelor de raze X, respectiv prezenta/absenta tranzițiilor de fază cristalină la temperatura camerei; sintetizarea și caracterizarea fizico-

chimica a materialelor oxidice de tipul TiO_2 și ZnO , materialelor semiconductoare de tip *n*, precum și materialelor delafositice, de tip crednerit, material de tip *p*, prin metode alternative.

(2020) 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 dilutiei fotorezistorului utilizat; proiectarea și realizarea aparaturii de laborator ce permite formarea imaginii folosind iluminarea Kohler.

(2021) realizarea imaginii unui electrod interdigital prin fotolitografie; obtinerea substratului fotosensibil și a substratului conductor electric; stabilirea parametrilor de lucru: timpul optim de expunere, respectiv dilutia optima a fotorezistorului utilizat și a influenței dilutiei substantei utilizate la corodarea chimica, respectiv a timpului optim de corodare chimica; obtinerea și testarea electrozilor interdigitali de tipul linie de intarziere.

(2022) proiectarea și realizarea instalatiei de testare a senzorilor; obtinerea și testarea senzorilor pe baza de unde acustice de suprafata, pe substrat piezoelectric; realizarea și optimizarea procedurii de fotolitografierea a unor electrozi interdigitali de Argint utilizând metoda fotorezistorului negativ; optimizarea aparaturii de laborator ce permite formarea imaginii dorite prin iluminare Kohler; obtinerea și testarea dispozitivelor SUAS cu diferite configuratii ale traductorilor de intrare și de iesire; obtinerea și testarea dispozitivelor SUAS cu diferite aperturi numerice; obtinerea și testarea dispozitivelor SUAS cu diferite distante între traductorii de intrare și de iesire; obtinerea și testarea dispozitivelor SUAS cu diferite suprafete sensibile dedicate sau reflectori de unda; măsurarea și evaluarea deplasării frecvenței de rezonanță, respectiv modificării nivelului semnalului dispozitivelor SUAS, în absența și prezența contaminantului, utilizând analizorul spectral RIGOL DSA832.

Dezvoltarea acestor direcții conduce la rezolvarea și finalizarea următoarelor tematici:

- realizarea sintezelor de laborator în vederea obținerii ceramicelor piezoelectrice de tipul $(\text{K,Na})\text{NbO}_3$ prin reacție în faza solidă;
- obtinerea niobatilor de sodiu și potasiu s-a axat pe diferite grade de dopare cu diferite structuri perovskitice de tipul SmBO_3 , respectiv GdBO_3 (unde $B = \text{Al, Co, Cr, Fe, Mn}$);
- obtinerea ceramicilor piezoelectrice pe baza de $(\text{K,Na})\text{NbO}_3$ dopate cu $x\text{mol } \% \text{ SmBO}_3$, respectiv GdBO_3 (unde $B = \text{Al, Co, Cr, Fe, Mn}$), unde $x = 0.25, 0.5, 0.75, 1, 2.5, 5$, prin reacție în faza solidă;
- studiul proprietatilor piezoelectrice, dielectrice și mecanice prin metode specifice
- studiul difractogramelor de raze X, respectiv prezența/absența tranzițiilor de faza cristalină la temperatura camerei; au fost observate variații ale formei, dimensiunii și distribuției cristalitelor prin imagistica SEM; au fost observate îmbunătățiri ale comportamentului dielectric în raport cu frecvența ale probelor dopate;
- determinarea marimilor piezoelectrice;
- determinarea coeficientului Poisson;
- obtinerea prin metode alternative a materialelor semiconductoare de „tip *n*” TiO_2 sau ZnO și a materialelor de „tip *p*” CuMnO_2 ;
- sintetizarea și caracterizarea fizico-chimică a materialelor oxidice de tipul TiO_2 și ZnO , materialelor semiconductoare de tip *n*, precum și materialelor delafositice, de tip crednerit, material de tip *p*, prin metode alternative;
- caracterizarea fizico-chimică a materialelor obținute;
- realizarea cu succes a fotolitografierii unor electrozi interdigitali de Au prin metoda fotorezistorului negativ;
- obtinerea peliculelor de substanță 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 dilutiei materialului fotosensibil asupra calității imaginii obținute;
- studiul influenței turatiei la care s-a efectuat depunerea prin „spin coating”;
- studiul influența numărului de straturi de substanță fotosensibilă depusă;
- studiul influența timpului de expunere asupra rezoluției imaginii obținute;
- realizarea dispozitivului experimental ce permite formarea imaginii folosind iluminarea Kohler.
- realizarea imaginii unui electrod interdigital prin metoda fotolitografiei;
- obtinerea substratului fotosensibil prin metoda metoda „spin coating”;
- obtinerea substratului conductor electric prin metoda evaporare termică;
- stabilirea parametrilor de lucru: timpul optim de expunere, respectiv dilutia optima a fotorezistorului utilizat;
- stabilirea influenței dilutiei substantei utilizate la corodarea chimică, respectiv a timpului optim de corodare chimică;
- obtinerea electrozilor interdigitali de tipul linie de intarziere;

- testarea electrozilor interdigitali de tipul linie de intarziere;
- proiectarea si realizarea instalatiei de testare a senzorilor;
- obtinerea si testarea senzorilor pe baza de unde acustice de suprafata, pe substrat piezoelectric, utilizind kitt-ul „Negative photorezistor I” ;
- realizarea si optimizarea procedurii de fotolitografierea a unor electrozi interdigitali de Argint utilizind metoda fotorezistorului negativ;
- optimizarea aparaturii de laborator ce permite formarea imaginii dorite prin iluminare Kohler, utilizind un microscopul LEVENHUK cuplat la o camera video LEVENHUK D740T 5.1M;
- obtinerea si testarea dispozitivelor SUAS cu diferite configuratii ale traductorilor de intrare si de iesire;
- obtinerea si testarea dispozitivelor SUAS cu diferite aperturi numerice;
- obtinerea si testarea dispozitivelor SUAS cu diferite distante intre traductorii de intrare si de iesire;
- obtinerea si testarea dispozitivelor SUAS cu diferite suprafete sensibile dedicate sau reflectori de unda;
- masurarea si evaluarea deplasarii frecventei de rezonanta, respectiv modificarii nivelului semnalului dispozitivelor SUAS, in absenta si prezenta contaminantului, utilizind analizorul spectral RIGOL DSA832.
- noi proiecte de cercetare-dezvoltare in cadrul planului national sau programe ale UE, pe baza rezultatelor stiintifice obtinute;
- 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 perioada 2019-2022, 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:

- Sinteza, caracterizarea si optimizarea ceramicilor piezoelectrice de tipul $(K,Na)NbO_3$
- Obținerea si caracterizarea materialelor semiconductoare de „tip n” (TiO_2 , ZnO) si a materialelor de „tip p” ($CuMnO_2$) – componente a heterojonctiunii, prin metode alternative
- Proiectarea si construirea unui SUAS cu substrat piezoelectric pe baza de ceramica piezoelectrica
- Proiectarea si realizarea dispozitivului de senzori pe baza de jonctiuni p-n de tipul. $TiO_2-CuMnO_2$., $ZnO-CuMnO_2$, care prezinta comportament de dioda
- Testarea dispozitivelor de tip SUAS pentru detectia gazelor de sera (NO_x si CO_x)
- Testarea dispozitivelor de tip senzor (cu comportament de dioda) pentru detectia gazelor de sera (NO_x si CO_x)
- Optimizarea metodelor si realizarea tehnologiei de obtinere a dispozitivelor de tip SUAS - partial

În etapele derulate în anul 2019 s-au realizat următoarele activități:

- Realizarea sintezelor de laborator in vederea obtinerii ceramicilor piezoelectrice de tipul $(K,Na)NbO_3$ prin reactie in faza solida;
- Obținerea si caracterizarea componentelor semiconductoare de tip n - TiO_2 si ZnO , precum si componenta de tip p - $CuMnO_2$ prin metode hidrotermale la temperaturi si presiuni joase pornind de la diferiti precursori solubili in apa.

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

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

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” si a substratului conductor electric prin metoda evaporare termica;
- Stabilirea parametrilor de lucru: timpul optim de expunere, respectiv dilutia optima a fotorezistorului utilizat, influenta dilutiei substantei utilizate la corodarea chimica, respectiv a timpului optim de corodare chimica;

- Obținerea și testarea electrozilor interdigitali de tipul linie de întârziere.
- În etapele derulate în anul 2022 s-au realizat următoarele activități:
- Proiectarea instalației de testare a senzorilor de gaze
 - Stabilirea componentei subansamblelor și a modului de asamblare a acestora
 - Realizarea instalației de testare
 - Stabilirea protocolului de lucru privind testarea senzorilor
 - Realizarea experimentelor de testare a senzorilor de gaze
 - Stabilirea condițiilor optime de utilizare a instalației
 - Realizarea experimentelor în instalația de testare a senzorilor pentru stabilirea valorii sensibilității la diferite concentrații de dioxid de carbon.
 - Obținerea straturi relativ groase conductoare electrice de Argint pe substrat piezoelectric, utilizând evaporarea termică (Emitech K975X);
 - Realizarea cu succes și optimizarea procedurii de fotolitografiere a unor electrozi interdigitali de Argint utilizând metoda fotorezistorului negativ;
 - Optimizarea aparaturii de laborator ce permite formarea imaginii dorite prin iluminare Kohler, utilizând microscopul LEVENHUK cuplat la o cameră video LEVENHUK D740T 5.1M;
 - Obținerea și testarea dispozitivelor SUAS cu diferite configurații ale traductorilor de intrare și de ieșire;
 - Obținerea și testarea dispozitivelor SUAS cu diferite aperturi numerice;
 - Obținerea și testarea dispozitivelor SUAS cu diferite distanțe între traductorii de intrare și de ieșire;
 - Obținerea și testarea dispozitivelor SUAS cu diferite suprafețe sensibile dedicate sau reflectori de undă;
 - Măsurarea și evaluarea deplasării frecvenței de rezonanță, respectiv modificării nivelului semnalului dispozitivelor SUAS, în absența și prezența contaminantului, utilizând analizorul spectral RIGOL DSA832.

2.2. Proiecte contractate:

Cod obiectiv	Nr. proiecte contractate	Nr. proiecte finalizate	Valoare (mii lei)				Total (lei)
			2019	2020	2021	2022	
1. PN 19 22 01	3	3	3.450.000	2.613.209	2.236.791	2.720.000	11.020.000
2. PN 19 02 02	1	1	910.896	819.104	1.240.000	1.480.000	4.450.000
3. PN 19 22 03	2	1	1.000.000	700.000	1.012.940	770.504	3.483.444
4. PN 19 02 04	1	1	1.000.000	700.000	1.250.000	1.186.368	4.136.368
Total:	7	6	6.360.896	4.832.313	5.739.731	6.156.872	23.089.812

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

	2019	2020	2021	2022	Total
I. Cheltuieli directe	4.028.467	3.331.046	3.825.674	3.421.051	14.606.238
1. Cheltuieli de personal	3.791.679	3.250.653	3.661.143	3.381.119	14.084.594
2. Cheltuieli materiale și servicii	236.788	82.102	164.531	39.932	523.353
II. Cheltuieli Indirecte: Regia	2.162.132	1.498.968	1.909.700	2.732.392	8.303.192
III. Achiziții / Dotări independente din care:	170.297	590	4.357	3.429	178.673
1. pentru construcție/modernizare infrastructura	0	0	0	0	0
TOTAL (I+II+III)	6.360.896	4.832.313	5.739.731	6.156.872	23.089.812

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 perioada 2019-2022, 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

- Dimensionarea unui liofilizator de înaltă temperatură;
- Proiectarea și construirea unui liofilizator de înaltă temperatură;
- Particule de hidroxiapatită cu factor de formă ridicat - Spectre de raze X; Imagini de microscopie electronica de scanare; Spectre în infraroșu; Curbe termogravimetrice;
- Structuri tridimensionale poroase de hidroxiapatita - spectre de raze X; imagini de microscopie electronica de baleiaj;
- 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;
- 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;
- Dezvoltarea metodei hidrotermale simple pentru sinteza rapidă a nanostructurilor oxidice cristaline bine definite.
- Analiza rezultatelor formării oxizilor de Fe Mn și Co cristalini și MnO₂, unde timpul și temperatura de autoclavare au avut o mare influență în procesul de obținere a structurii dorite.
- Studiul electrochimic efectuat pe suporturi de grafit modificate cu compoziții care conțin birnessit, având ca scop identificarea electrodului modificat cu cea mai mare capacitate electrică dublu strat, a relevat că acest electrod este cel modificat prin turnarea în picătură a MnO₂ și a carbonului conductor Vulcan dintr-o suspensie în etanol.
- S-au măsurat valorile capacității dublu strat, ale factorului de rugozitate și ale suprafeței electrochimic active obținute pentru electrodul modificat.
- Realizarea mai multor tipuri de structuri poroase, inclusiv aerogeluri pe bază de grafit și argint decorate cu particule de platină.
- Testarea electrochimică a electrozilor pentru a evidenția comportamentul acestora în reacțiile de degajare ale H₂ și O₂.
- Identificarea posibilelor aplicații în construcția de celule de electroliză și pile de combustie.
- Modificarea suprafeței compozitelor conductoare cu ajutorul unui catalizator de Pt (folosit uzual în componența pililor de combustie), pentru a micșora suprapotențialele de degajare a H₂, respectiv O₂.
- Caracterizarea electrochimică a noilor electrozi prin tehnica voltametriei, prin înregistrarea de voltamograme ciclice și liniare.
- Depunerea matriceală a GO/TiO₂ pe ITO;
- AFM – realizat pe distanța dintre depunerea de GO și TiO₂;
- Rezistența electrică, tensiunea electrică, intensitatea curentului electric al materialelor depuse (matrici GO / TiO₂);
- Depunerea matriceală a GO/ZnO/GO pe ITO;

- Rezistența electrică, tensiunea electrică, intensitatea curentului electric ale materialelor depuse (matrici GO/ZnO/GO);
- Modelarea și observarea experimentală a supra-curentului electric "verde" (pe suport grafenic) cu ajutorul grafentronicii, prin configurații inovative de heterojoncțiuni matriceale (Oxid de Grafen/GO, în combinație cu Oxid de Titan TiO₂, respectiv de Zinc/ZnO);
- Proiectarea joncțiunilor matriceale de tip grafentronic cu 3 oxizi-4 atomi (Graphene-oxide GO∩ZnO∩TiO₂) prin combinații inteligente cu efecte cuantice asupra îmbunătățirii transportului informațional cuantic folosind tranzistoarele cu porți grafenice obținute (GGT), înlocuind astfel tehnologia pe bază de siliciu (Silicon Gate Transistors) și a efectului aliat MOSFET (*metal-oxide-semiconductor field-effect transistors*) prin versiunea prezentată GFET (*graphene-based field effect transistor*);
- 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;
- 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 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;
- 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;
- Realizarea și caracterizarea unor microcircuite cuantice pe bază de grafen depus controlat, cuplate cuantic și funcționalizat în configurații matriceale (inovativ față de heterojoncțiunea transversală prezentă, cele actuale fiind tributare blocajului Coulombic și interacțiilor slabe van der Waals) cu controlul punctelor de contact, astfel: fie prin zone de multigrafenă matriceală, respectiv prin funcționalizare pe substrat de mono-grafenă – cu realizare de clustere cuantice capabile de stocare a energiei moleculare prin efecte locale de electrochimie cuantică (de spin), fie prin efecte de tunelare controlată în grafene cu defecte topologice și/sau structurale (așa-numitele grafene semiconductoare), respectiv prin fotoactivarea clusterelor cuantice de grafen depuse învecinat, de tip micro-circuit integrat cu porți logice, nano-deca semiconductori cuantici cuplați magnetic (de spin) și foto-activați cu precizie metrologică (prin combinarea efectelor Hall, Josephson și de tunelare) a funcțiilor de curent, potențial și randament cuantic asociate nanostructurilor investigate.
- Materiale – nanomateriale cu morfologii diferite de tipul WO₃ și Fe₂O₃ sub forma de pulberi, dar și crescute „in situ” pe placuta de wolfram și respectiv, fier;
- Oxizi pe baza de cupru (CuO/Cu₂O) cu diferite dimensiuni și morfologii ca și material transportor de goluri în celula solara perovskitica;
- Oxizi de fier (Fe₂O₃) și oxid de titan (TiO₂) cu diferite dimensiuni și morfologii ca și material transportor de electroni în celula solara perovskitica;
- Compuși nanometrici de CuInS₂/ZnS înglobați în polymethylmethacrylate (PMMA);
- Compuși Y₂O₃:Er/Yb înglobați în polymethylmethacrylate (PMMA);
- Ceramici piezoelectrice pe baza de (K_{0.5}Na_{0.5})NbO₃;
- Ceramici piezoelectrice cu structura perovskita de tipul SmBO₃, respectiv GdBO₃ (unde B= Al, Co, Cr, Fe, Mn);
- Obținerea, caracterizarea și optimizarea nanomaterialelor de tipul Li₄(M,Mn)₂O₅, unde M=V,Cr, folosite în stocarea energiei electrice.
- Obținere celule solare sensibilizate cu colorant (DSSC-uri) pe baza de oxizi de fier crescuți hidrotermal direct de placuta metalica de fier, folosind coloranți și electroliti organici., după cum urmează:
 - celulele solare sensibilizate cu colorant (DSSC-uri) pe baza de Fe₂O₃ crescut crescut „in situ” hidrotermal direct pe placuta metalica de fier cu PVP în solutia hidrotermala;
 - celulele solare sensibilizate cu colorant (DSSC-uri) pe baza de Fe₃O₄ crescut crescut „in situ” hidrotermal direct pe placuta metalica de fier cu EC în solutia hidrotermala;
 - optimizarea parametrilor de sinteza a filmelor de oxid de fier în funcție de eficiența DSSC-urilor;
 - optimizarea celulelor solare de tip n DSSC prin alegerea colorantului și electrolitului optim;
 - identificarea problemelor tehnologice ce limitează încă eficiența celulelor solare, urmand a fi rezolvate în continuarea etapei a treia.
- Obținere celule solare (sensibilizate cu colorant-DSSC și perovskitice) și generatoare piezoelectrice au fost obținute, după cum urmează:
 - Celulele solare sensibilizate cu colorant (DSSC-uri) pe baza de oxid de wolfram crescut „in situ” hidrotermal sau termic în atmosfera controlată oxidativă direct pe placuta metalica de wolfram;
 - S-a demonstrat efectul benefic al hidrogenului suplimentar asupra oxizilor de cupru, prin promovarea ancorării colorantului (chemisorbtia puternică a grupărilor de ancorare -COOH pe substratul semiconductor), ducând 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 Cu₂O/CuO apare ca fiind cea mai bună alegere în proiectarea fotocatozilor extrem de eficienți în DSSC de tip-tandem. Implementarea și testarea acestuia este însă condiționată de proiectarea și sinteza a noi coloranți organici ca sensibilizatori pentru DSSC de tip-p, caracterizați 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 (CuO/Cu₂O) și oxizi de fier (Fe₂O₃) sau oxid de titan (TiO₂);

- 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.
- Optimizarea metodei hidrotermale pentru obtinerea de cantitati necesare pentru realizarea electrozilor pozitiv al bateriei pe baza de Mn prin utilizarea unei etape intermediare de agitare sub temperatura controlata, pentru a mari solubilitatea materialelor precursor;
- Eficientizarea materialelor prin utilizarea unei temperaturi de sinteza hidrotermala de 250 °C si a timpului de reactie de 48 h pentru a asigura o mai buna cristalizare si astfel o mare stabilitate a materialelor in procesul de incarcare descarcare a ionilor de litiu;
- Materiale pentru baterii de tipul $\text{Li}_4\text{Mn}_2\text{O}_5$ - au fost determinati si optimizati parametrii hidrotermali care favorizeaza si stabilizeaza faza cristalina $\text{Li}_4\text{Mn}_2\text{O}_5$, voltamograma ciclica demonstrand capacitatea acestui material de a fi folosit in 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 determinati si optimizati parametrii hidrotermali care favorizeaza si stabilizeaza faza cristalina $\text{Li}_4\text{V}_{0.6}\text{Mn}_{1.4}\text{O}_5$, valoarea mare a potentialului de oxidare pune in evidenta efectul benefic al substitutiei V de catre Mn. Insa instabilitatea structurii cristaline reprezinta un dezavantaj pentru utilizarea acestui material ca si 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 determinati si optimizati parametrii hidrotermali care favorizeaza si stabilizeaza faza cristalina $\text{Li}_4\text{Cr}_{0.6}\text{Mn}_{1.4}\text{O}_5$, valoarea mare a potentialului de oxidare pune in evidenta efectul benefic al substitutiei Cr de catre Mn. Insa instabilitatea structurii cristaline reprezinta un dezavantaj pentru utilizarea acestui material ca si dispozitiv de stocare a energiei;
- Obtinerea de dispozitive integrate de generare si stocare de energie electrica, obiectivul principal al proiectului, implica ca in etapa urmatoare, sa se realizeze proiectarea si constructia unei baterii termice, parte din dispozitivul integrat.
- Proiectarea si construirea unei baterie de stocare a energiei termice. Designul utilizat este nou, pe baza de tevi independente de aluminiu umplute cu material PCM de diverse tipuri, asamblate in fascicule cu distanta constanta intre ele, care permite circulatia apei. Acest sistem permite utilizarea oricorui materiale de test. Mai mult, pot fi utilizate simultan pana la 5 tipuri de materiale PCM cu proprietati diferite, ceea ce permite incarcarea si descarcarea bateriei cu agenti termici de temperaturi diferite.
- In vederea utilizarii ulterioare a deseurilor de inox, aluminiu, alama sau cupru, s-au realizat amestecuri de parafina cu fire metalice in vederea imbunatatirii conductivitatii termice a materialului compozit utilizat.
- Bateria termica a fost supusa catorva teste de transfer termic prin conductie, primele date fiind incurajatoare.

OBIECTIVUL PN 19 22 02. PROTECȚIA MEDIULUI ȘI TEHNOLOGII CURATE

- Materiale perovskitice de LaMnO_3 dopate care sa prezinte proprietati selective;
- Sinteza materialelor de LaMnO_3 dopate (Ag sau Ti) prin metoda ultrasonica cu sonotroda imersata in mediu de reactie si metoda sol-gel;
- Caracterizarea fizico chimica a materialelor obtinute.
- 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 modificate 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.
- 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, contin 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).
- Au fost obținute filme subțiri (material hibrid pe baza de montmorillonite funcționalizat cu materiale perovskitice obținute prin metoda solid-solid), cu ajutorul metodei spin-coating utilizând 1500 rpm, timp de 30 s, urmată de calcinare la $450 \text{ }^\circ\text{C}$ timp de 60 de minute cu rata de încălzire de $1 \text{ }^\circ\text{C}/\text{min}$. Pentru a pune în evidență uniformitatea stratului, acestea au fost caracterizate prin microscopie de forță atomică și microscopie confocală. Mai mult, pentru a studia proprietățile electrice ale filmelor obținute a fost determinat potențialul benzii plate (flat-banda potential) care a fost obținut cu ajutorul metodei Mott-Schottky.
- Din analiza rezultatelor obținute, potențialul de bandă plană (V_{fb}) pentru Hb_ned este de -0.74V și crește la -0.91V pentru Hb_2. Pentru probele Hb-3 V_{fb} este de -0.44V , iar pentru Hb-6 V_{fb} este de -0.81V . Din analiza Mott-Schottky se poate observa faptul că toate probele au un caracter de semiconductor de tip-n. De asemenea, s-a determinat numărul de purtători de sarcină pentru toate cele 4 probe. Pentru proba Hb_ned - Nd este de $6.48 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ și crește la $7.46 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ pentru Hb_6 și $9.93 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ pentru Hb-2. Se poate observa faptul că densitatea de electroni crește odată cu introducerea ionilor de Eu și Ag în interorul materialului LaMnO_3 . O densitate de electroni și mai mare se observă atunci când se introduce ioni de Pd. Valoarea densității crește până la $2.29 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.
- Pentru realizarea proprietăților electrice s-a ajuns la concluzia, că filmele să fie depuse pe suport de sticlă, deoarece datorită stratului foarte subțire, depunerea unei masti de Ag poate conduce la o penetrare a argintului până la substratul de FTO și implicit la un scurt circuit. Astfel, depunerea filmelor a fost realizată cu ajutorul metodei spin-coating, utilizând 2000 rpm, timp de 30 s, urmată de calcinare la $450 \text{ }^\circ\text{C}$, timp de 60 de minute, cu rata de încălzire de $1 \text{ }^\circ\text{C}/\text{min}$. Mască de Ag a fost depusă cu ajutorul evaporării termice și este depusă pe o suprafață mică din film ca să poată realiza un contact cât mai bun între fil-mască de argint. Firele au fost lipite cu ajutorul pastei de indiu, utilizând ultrasunetele. În felul acesta a rezultat un contact omic, având o rezistență internă de aproximativ 0.5Ω .

OBIECTIVUL PN 19 22 03. SĂNĂTATE ȘI CALITATEA VIEȚII

- Obținerea extractelor de compuși naturali din matrici autohtone prin diverse metode: extracția clasică (decoct, macerare, extracție sub agitare, extracție sub presiune), în câmp ultrasonor, în câmp cu microunde; testarea unor solvenți de extracție: apă, alcoolii inferiori, acetonitril;
- Obținerea unor compuși noi biologic activi derivați ai acidului salicilic: anilide, esteri, hidrazide și hidrazone.
- 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).
- Efectuarea unor studii computaționale de modelare moleculară a structurii complexilor de incluziune ciclodextrină/compuși naturali; optimizarea geometrică a complexilor 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 complecși 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 urmăriți următorii parametri: raport molar optim, cantitate solvent, timp triturare/reacție, temperatură, în vederea stabilirii metodei optime de sinteză a compușilor de incluziune. Complecșii 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/absorbanță 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 compușilor 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 compușii ca atare.

- Finalizarea caracterizării complexilor în fază solidă ciclodextrine/compuși naturali și ciclodextrine/compuși sintetici. Caracterizarea fizico-chimică a complexilor de incluziune s-a realizat folosind tehnicile: spectrometrie FTIR și Raman, difracția de raze X RX, spectrofotometrie UV-VIS-NIR, microscopia electronică de baleiaj SEM și analiză termică (analiza termogravimetrică TG, analiza calorimetrică diferențială DSC). Tehnicile de caracterizare utilizate pentru pulberile obținute au confirmat formarea cu succes a complexilor de incluziune ai ciclodextrinelor (α -ciclodextrină, β -ciclodextrină, γ -ciclodextrină, 2-hidroxi-propil- β -ciclodextrină) cu extractele naturale obținute, salicină și derivații hidroxibenzamidici sintetizați.
- Realizarea cercetărilor experimentale privind evaluarea activităților antimicrobiene a compușilor bioactivi studiați și a complexilor de incluziune în ciclodextrine pe tulpini microbiene de referință (*Streptococcus mutans* ATCC 35668, *Streptococcus pyogenes* ATCC 19615, *Staphylococcus aureus* ATCC 25923, *Escherichia coli* ATCC 25922, *Pseudomonas aeruginosa* ATCC 27853, *Candida albicans* ATCC 10231) și/sau pe tulpini izolate clinic (*Staphylococcus aureus*, *Enterococcus faecalis*, *Streptococcus agalactiae*, *Bacillus cereus*, *Escherichia coli*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Candida parapsilosis*, *Candida albicans*).
- Rezultatele obținute privind activitatea antimicrobiană a extractelor de plante din familia Brassicaceae pe tulpini microbiene de referință și izolate clinic au demonstrat un efect antimicrobian asupra bacteriilor Gram-negative puțin mai mare decât pentru cele Gram-pozitive în cazul extractelor de varză albă și ridiche neagră. Majoritatea tulpinilor bacteriene au prezentat sensibilitate moderată la extractele de conopidă sau broccoli și au fost mai sensibile la extractele de varză albă și ridiche neagră pentru care au fost evidențiate și efectele bactericide. Rezultatele obținute pot sugera că unele formule de extracte alcoolice de varză și ridiche neagră pot fi utile în lupta antimicrobiană. Mai mult, se poate emite ipoteza posibilei utilizări a acestor extracte ca noi opțiuni terapeutice pentru bacteriile rezistente. Rezultate benefice ar putea fi obținute prin utilizarea acestor extracte ca tratament topic sub formă de unguente.
- Demonstrarea rolului benefic al complexării asupra eficienței derivaților de salicilanilide cloro-substituiți noi, pornind de la premisa că captarea compușilor antimicrobieni în ciclodextrine ar trebui să conducă la un control adecvat al eliberării medicamentului, astfel încât medicamentele să poată fi folosit mai eficient. Complexii obținuți cu derivați de salicilanilide cloro-substituiți au demonstrat activitate antibacteriană bună asupra unor tulpini bacteriene Gram-pozitive (*Streptococcus mutans* ATCC 35668, *Streptococcus pyogenes* ATCC 19615, *Staphylococcus aureus* ATCC 25923).

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

- Realizarea sintezelor de laborator în vederea obținerii ceramicelor piezoelectrice de tipul $(K,Na)NbO_3$ prin reacție în fază solidă;
- Obținerea și caracterizarea componentelor semiconductoare de tip n - TiO_2 și ZnO , precum și componenta de tip p - $CuMnO_2$ prin metode hidrotermale la temperaturi și presiuni joase pornind de la diferiți precursori solubili în apă.
- Studii experimentale de laborator concretizate prin: obținerea de loturi de nanomateriale cu morfologii diferite de dioxid de titan (TiO_2), loturi de nanomateriale cu morfologii diferite de oxid de zinc (ZnO), loturi de nanomateriale de tip ceramice $CuMnO_2$;
- Obținerea de ceramice piezoelectrice pe baza de $(K,Na)NbO_3$ dopate cu $xmol\%$ $SmBO_3$, respectiv $GdBO_3$ (unde B= Al, Co, Cr, Fe, Mn), unde $x= 0.25, 0.5, 0.75, 1, 2.5, 5$,
- Studiul difractogramelor de raze X; Imagistica prin microscopie electronică; Comportamentul dielectric al materialelor la diferite frecvențe; Determinarea marimilor piezoelectrice; Calcularea coeficientului Poisson.
- 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 duratei cu care este depus fotorezistorul, respectiv diluției fotorezistorului utilizat;
- Proiectarea și realizarea aparaturii de laborator ce permite formarea imaginii folosind iluminarea Kohler;
- Rezultatele obținute vor sta la baza realizării tehnologiilor inovative de laborator de producere a acestor dispozitive tip senzor;
- Astfel, se vor desfășura activități pentru stabilirea parametrilor de lucru, a aparaturii necesare, a modului de lucru, a bilanțului de materiale și a consumurilor specifice la nivel laborator în vederea elaborării tehnologiei de obținere a straturilor senzitive;
- Se va redacta setul de parametri caracterizați electric pentru răspunsul dispozitivelor senzitive și valorile așteptate fără substanța senzitivă;

- Metodologia ce urmeaza a fi dezvoltata ,va include descrierea aparaturii si a instrumentelor care trebuie utilizate pentru efectuarea masuratorilor, precum si a punctele de reglaj.
- Realizarea cu succes si optimizarea procedului de fotolitografiere a unor electrozi interdigitali de Argint utilizind metoda fotorezistorului negativ;
- Obținerea unor straturi groase, conductoare electric de Argint pe substratul de cuarț monocristalin, utilizând evaporarea termica;
- Imaginea electrozilor interdigitali a fost obtinuta utilizind imaginea in negativ a obiectului dorit a fi fotolitografiat, respectiv metoda coroziunii chimice de realizare a imaginii in pozitiv pe substratul dorit;
- Optimizarea timpului de expunere, a dilutiei fotorezistorului utilizat, dilutiei substantei utilizate la corodarea chimica, respectiv a timpului optim de corodare chimica;
- Optimizarea aparaturii de laborator ce permite formarea imaginii dorite prin iluminare Kohler;
- Obținerea electrozilor interdigitali de tipul linie de intarziere, respectiv testarea acestora prin analiza spectrala utilizind analizorul RIGOL DSA832.
- Proiectarea si realizarea instalatiei de testare a senzorilor.
- Camera de testare a senzorilor este compusa din mai multe subansamble:camera de amplasare senzor realizata din Teflon, capac etansare camera testare realizat din Teflon, cupola de sticla, care permite observarea senzorilor in timpul testarii acestora, zone de intrare si iesire gaze, pini de tip sonda placate cu aur, care permit realizarea contelor ohmice si achizitia de date generate de senzorul testat, mufa achizitie de date, care permite colectarea datelor fara a modifica conditiile de atmosfera controlata din incinta de testare, incalzitor, care permite colectarea datelor senzorilor la diferite temperaturi, astfel incat sa se poata determina variatia sensibilitatii in functie de temperatura, cat si temperatura la care senzorul prezinta cea mai buna sensibilitate.
- Instalatia de testare este compusa din urmatoarele subansamble: butelii de gaz, umidificatoare, robineti, controlere de masa, camera amestecare gaze, camera de testare senzori, masurare si achizitie date.
- Masuratorile electrice pentru testarea senzitivitatii senzorilor au fost realizate utilizand instrumentul model Keithley 2450 SourceMeter SMU.
- Masuratorile de tipul curent-tensiune (I-V) au fost efectuate pentru demonstrarea comportamentului heterojonctiunii n-TiO₂/p-CuMnO₂ si sensibilitatea la diferite concentratii de gaze.
- Măsurătorile au fost înregistrate în polarizare directă cu „-“ în zona „n” sticla FTO și „+” pe filmul semiconductor CuMnO₂ de tip „p”. Tensiunea aplicată a variat în intervale cuprinse între -2 V și 2 V cu pasul de 10 mV/s. Din masuratorile efectuate s-a putut observa o modificare a valorilor curentilor atat in partea pozitiva cat si in cea negativa a curbelor curent-tensiune acest fapt demonstrand sensibilitatea la interactiunea cu gazul targetat a heterostructurilor obtinute. De asemenea, se poate observa o crestere liniara a curentilor in functie de concentratia de CO₂. La o concentratie de 250 ppm CO₂ in gazul inert transportor de N₂ la un current de 2V s-a inregistrat un current de 3,27 μA, acesta crescand la 3,93 μA, 4,86 μA, 5,73 μA si 6,76 μA la 500, 750, 1000 si 1500 ppm CO₂. Sensibilitatea senzorului a fost determinata scanzand tensiunile proportional cu concentratia de CO₂ astfel ca la o diferenta de 250 ppm s-a obtinut o sensibilitate de 0,66, la 500 ppm 1,6 sensibilitate, iar la 1000ppm s-a obtinut o sensibilitate de 2,46.
- Obținerea si testarea senzorilor pe baza de unde acustice de suprafata, pe substrat piezoelectric, utilizind kitt-ul „Negative photorezistor I”.
- S-au obtinut straturi relativ groase conductoare electric de Argint pe substrat piezoelectric, utilizind evaporarea termica (Emitech K975X);
- A fost realizat cu succes si optimizat procedeu de fotolitografierea a unor electrozi interdigitali de Argint utilizind metoda fotorezistorului negativ; a fost optimizata aparatura de laborator ce permite formarea imaginii dorite prin iluminare Kohler, utilizind un microscopul LEVENHUK cuplat la o camera video LEVENHUK D740T 5.1M;
- Au fost obtinute si testate dispozitive SUAS cu diferite configuratii ale traductorilor de intrare si de iesire; au fost obtinute si testate dispozitive SUAS cu diferite aperturi numerice; au fost obtinute si testate dispozitive SUAS cu diferite distante intre traductorii de intrare si de iesire; au fost obtinute si testate dispozitive SUAS cu diferite suprafete sensibile dedicate sau reflectori de unda; au fost masurate si evaluate deplasarii frecventei de rezonanta, respectiv modificarii nivelului semnalului dispozitivelor SUAS, in absenta si prezenta contaminantului, utilizind analizorul spectral RIGOL DSA832.

4. Prezentarea rezultatelor:

4.1. Valorificarea în producție a rezultatelor obținute:


Denumirea proiectului	Tipul rezultatului	Efecte scontate
	(studiu proiect, prototip, tehnolog, etc., alte rezultate)	
1. Tehnologii avansate pentru materiale dedicate sectoarelor energetice	Studiu proiect. Schیțe tehnice. Prototip liofilizator. Spume ceramice. Buletine analiză. Metoda sinteză.	Pana la momentul actual obiectivele au fost indeplinite in proportie de 100%.
	Raport de cercetare. Esantioane de nanoparticule de argint, spectre XRD, imagini SEM, spectre EDS. Esantioane de aerogeluri metalice si hibride metal-polimer. Curbe reprezentand variatia rezistentei electrice în functie de gradul de comprimare.	S-au realizat eşantioane de nanofire de argint, imagini SEM, spectre EDX. S-au realizat eşantioane de aerogeluri metalice/hibride metal-polimer. S-au efectuat măsuratori de compresiune - rezistența electrică pentru materialele hibride obținute.
	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 si de carbon obtinute prin descompunerea termica a celulozei cu ajutorul nanoparticulelor anorganice de CaCO ₃ si NH ₄ Cl; - 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 si DSR, observându-se proprietăți interesante și utile. Aceste materiale pot fi utilizate la: - multiple aplicații de la adsorbția compușilor 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 in cadrul sistemelor de control a temperaturii varistoarelor, fiind astfel un pas suplimentar facut pentru atingerea obiectivelor finale ale proiectului.
	Raport de cercetare. Tehnologii de obținere a unor materiale cu densitate de stocare mare aenergieibazate pe diferitetipuri de oxizi. Realizarea de materiale poroase, în special structuri poroase pe bază de	S-au obținut diverși oxizi sub forma de pulberi care mai apoi au fost aplicați in domeniul de stocare al energiei. Obiectivele principale ale fazelor 5 și 6 au fost îndeplinite. Țintele stabilite au fost atinse, iar indicatorii asociați

	<p>grafit și pe bază de argint, nedecorate și decorate cu particule de platină. Imagini de microscopie electronică de scanare;</p> <p>spectre EDX și hărți compoziționale;</p> <p>spectre de difracție de raze X; buletine de analiză MP-AES; eșantioane de electrozi poroși; eșantioane de electrozi compacți; voltamograme liniare și ciclice; spectre Raman.</p>	<p>pentru monitorizare și evaluare au fost îndepliniți. S-au obținut toate rezultatele estimate.</p>
<p>2. Grafentronică cu electrochimie cuantică de spin</p>	<p>Raport de cercetare.</p> <p>Modelarea și observarea experimentală a supra-curentului electric "verde" (pe suport grafenic) cu ajutorul grafentronicii, prin configurații inovative de heterojoncțiuni matriceale (Oxid de Grafen/GO, în combinație cu Oxid de Titan TiO_2, respectiv de Zinc/ZnO).</p> <p>Formularea conceptului tehnologic cu respectarea principiilor de bază.</p> <p>Proiectarea conceptuală a circuitului pompei de încărcare a bootstrap-ului folosind tranzistoarele T1-T3, care pot fi considerate sub forma joncțiunilor matriceale de 3oxizi-4tomi (Grafen-oxid, $ZnO \cap TiO_2$).</p> <p>Studii analitice și de laborator folosind diverse tehnici (depunere în strat, depunere prin ablație laser sau prin spin coating) în scopul validării separate a randamentului de încărcare a bootstrap-ului pentru joncțiunile depunerilor matriceale 3oxizi-4tomi. ($Graphene-oxide \cap ZnO \cap TiO_2$) și a contactelor de încărcare și de epuizare îngropate care fac parte din tranzistorul proiectat cu porți grafenice (GGT) prin diferite tehnici (adică straturi de depunere, prin ablație laser sau acoperire prin rotire).</p>	<p>Obiectivele initial propuse pentru primele etape au fost indeplinite in totalitate, fiind finalizate toate obiectivele specifice asumate in cadrul primelor etape ale acestui proiect.</p>
	<p>Raport de cercetare.</p> <p><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></p>	<p>Obiectivele initial propuse pentru aceste etape au fost indeplinite in totalitate, fiind finalizate toate obiectivele specifice asumate in cadrul respectivelor etape ale acestui proiect.</p>

	<p>Algoritmul „<i>Nanomotor pe bază de rotaxan fotoactivat în 4 timpi (ultimul stadiu = primul stadiu)</i>” 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 termofotochimică și electrofotochimică pentru mașinile moleculare pe bază de rotaxani observabili.</p>	
	<p>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. Metodologia de acoperire completă a nano-spațiului pentru structuri chimice topologice, de tip grafenic, cu reprezentarea cuanto-geometrică a impurităților de goluri nano-spațiale.</p>	<p>Obiectivele initial propuse pentru aceste etape au fost indeplinite in totalitate, fiind finalizate toate obiectivele specifice asumate in cadrul respectivelor etape ale acestui proiect.</p>
	<p>Raport de cercetare. Proiectarea, caracterizarea și realizarea de heterojoncțiuni grafenice matriceale superconductoare; Identificarea/Măsurarea supercurentului cuantic; Identificarea temperaturii critice de supercurent; Observarea prin imagistică electronică a tranziției de fază pentru statistica clusterială fermioni-bosoni; Compararea rezultatelor pentru diverse configurații matriceale grafentronice.</p>	<p>Obiectivele initial propuse pentru aceste etape au fost indeplinite in totalitate, fiind finalizate toate obiectivele specifice asumate in cadrul respectivelor etape ale acestui proiect.</p>
<p>3. Tehnologii inovative de obtinere de dispozitive integrate de generare si stocare de energie electrica</p>	<p>1. Tehnologie de obtinere de materiale pentru celule solare sensibilizate cu coloranti (DSSC):nanomateriale de tipul WO_3 si Fe_2O_3 sub forma de pulberi, dar si crescute „ in situ” pe placuta de wolfram si respectiv, fier. 2. Tehnologie de obtinere de materiale pentru celule solare perovskitice: oxizi pe baza de cupru</p>	<p>Obiectivul fazei I, precum si indicatorii pentru monitorizare si evaluare au fost indepliniti in totalitate, materialele necesare proiectarii, constructiei si testarii dispozitivelor de generare de energie electrica fiind obtinute. Obiectivul fazei II, precum si indicatorii pentru monitorizare si evaluare au fost indepliniti in</p>

	<p>(CuO/Cu₂O)cu diferite dimensiuni si morfologii ca si material transportor de goluri in celula solara perovskitica si oxizi de fier (Fe₂O₃) si oxid de titan (TiO₂) cu diferite dimensiuni si morfologii ca si material transportor de de electroni in celula solara perovskitica.</p> <p>3. Tehnologie de obtinere de materiale pentru concentratoare solare luminescente (LCS) compuși nanometrici de CuInS₂/ZnS si Y₂O₃:Er/Yb înglobați în polymethylmethacrylate (PMMA).</p> <p>4. Tehnologie de obtinere de materiale piezoelectrice pe baza de (K_{0,5}Na_{0,5})NbO₃ si cu structura perovskita de tipul SmBO₃, respectiv GdBO₃ (unde B= Al, Co, Cr, Fe, Mn).</p> <p>5. Dezvoltarea unei tehnologii hidrotermale de obtinere a materialelor de tipul Li₄(M,Mn)₂O₅ unde M=V,Cr.</p> <p>1. Materiale pentru celule solare sensibilizate cu coloranti (DSSC):nanomateriale de tipul WO₃ si Fe₂O₃ sub forma de pulberi, dar si crescute „ in situ” pe placuta de wolfram si respectiv, fier.</p> <p>2. Materiale pentru celule solare perovskitice: oxizi pe baza de cupru (CuO/Cu₂O)cu diferite dimensiuni si morfologii ca si material transportor de goluri in celula solara perovskitica si oxizi de fier (Fe₂O₃) si oxid de titan (TiO₂) cu diferite dimensiuni si morfologii ca si material transportor de de electroni in celula solara perovskitica.</p> <p>3. Materiale pentru concentratoare solare luminescente (LCS) compuși nanometrici de CuInS₂/ZnS si Y₂O₃:Er/Yb înglobați în polymethylmethacrylate (PMMA).</p> <p>4. Materiale piezoelectrice pe baza de (K_{0,5}Na_{0,5})NbO₃ si cu structura perovskita de tipul SmBO₃, respectiv GdBO₃ (unde B= Al, Co, Cr, Fe, Mn).</p> <p>5. Materiale de tipul Li₄(M,Mn)₂O₅, unde M=V,Cr, cu diferite morfologii si dimensiuni.</p>	<p>totalitate, materialele necesare proiectarii, constructiei si testarii dispozitivelor de stocare de energie electrica fiind obtinute.</p> <p>Obtinere de dispozitive integrate de generare si stocare de energie electrica, <i>obiectivul principal al proiectului</i>, implica ca in etapele urmatoare din 2020, sa se realizeze proiectarea, constructia, testarea si eficientizarea dispozitivelor de generare de energie electrica, parte din dispozitivul integrat, pe baza materialelor obtinute in faza I si II din 2019.</p>
--	--	---

	<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>
	<p>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;</p> <p>Proiectarea, construirea si testarea unui dispozitiv de analiza a caracteristicii de incarcare/descarcare a bateriilor pe baza de Li si Mn.</p>	<p>Obiectivul fazei a IV-a, precum si indicatorii pentru monitorizare si evaluare au fost indepliniti in totalitate.</p> <p>Pe baza materialelor obtinute in etapele anterioare, in etapa din 2021 s-a realizat proiectarea, constructia, testarea si eficientizarea dispozitivelor de stocare de energie electrica;</p> <p>Obtinerea de dispozitive integrate de generare si stocare de energie electrica, obiectivul principal al proiectului, implica ca in etapa urmatoare sa se realizeze proiectarea si constructia unei baterii termice, parte din dispozitivul integrat.</p>
	<p>Baterie de stocare a energiei termice</p> <p>Schite constructive si calcul de dimensionare tehnologica a bateriei termice</p> <p>Date functionale, grafice privind variatia temperaturii pe fascicolul de</p>	<p>Obiectivele propuse in cadrul etapei au fost atinse integral.</p> <p>Mai jos se poate observa bateria termica ca obiect fizic obtinut, montata in cadrul unsui sistem pentru simularea stocarii caldurii.</p>

	tevi si in lichid in timpul testarii bateriei termice.	
4. Nanotehnologii inovative pentru obtinerea de materiale hibride avansate cu aplicatii in protectia mediului	Studii. Tehnologii de obtinere materiale perovskitice. Materiale hibride.	Obtinerea de materiale perovskitice; Caracterizarea morfo-structurara; Electrozi modificati cu material perovskitic.
	Studii. Electrozi modificati cu materiale perovskitice	Testarea comportamentului electrochimic; Activitatea electrocatalitica a electrozilor modificați cu perovskiti pentru reacția de degajare/ reducere a oxigenului.
	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 functionalizate care sa prezinte activitate electrocatalitica.
	Filme subtiri modificate cu material hibride.	Obtinerea de filme subtiri modificate cu material hibride.
5. Complecși de incluziune supramoleculară a unor compuși naturali și de sinteză cu aplicații în sănătate	Studiu. Raport de cercetare, lucrari stiintifice comunicate	Au fost realizate primele 2 faze: - Extracția compușilor naturali bioactivi din matrici vegetale autohtone; - Sinteze chimice de compuși bioactivi, derivati ai acidului salicilic și toate obiectivele acestor faze au fost îndeplinite
	Studiu. Raport de cercetare, lucrari stiintifice comunicate	Caracterizarea extractelor obtinute; Caracterizarea produsilor de sinteza obtinuti.
	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 in totalitate, fiind finalizate toate obiectivele specifice asumate in 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.
	Rapoarte științifice de fază. Complecși de incluziune în	Obiectivele initial propuse pentru aceste etape au fost indeplinite in

	<p>ciclodextrine caracterizați prin tehnici moderne de analiză fizico-chimică: UV-Vis-NIR, FTIR, RAMAN, SEM, RX, TG/DSC ;</p> <p>Activități antimicrobiene determinate <i>in vitro</i> prin metoda disc-difuzimetrică, valorile concentrațiilor minime inhibitorii și valorile concentrațiilor minime bactericide/fungicide pe diferite tulpini microbiene de referință și/sau izolate clinic.</p>	<p>totalitate, fiind finalizate toate obiectivele specifice asumate în cadrul respectivelor etape ale acestui proiect.</p>
<p>6. Noi tehnologii aplicate în dezvoltarea unor dispozitive de tip senzor pentru monitorizarea mediului</p>	<p>Studii experimentale de laborator concretizate prin: obținerea de loturi de nanomateriale cu morfologii diferite de dioxid de titan (TiO₂), loturi de nanomateriale cu morfologii diferite de oxid de zinc (ZnO), loturi de nanomateriale de tip crednerite CuMnO₂; obținerea de ceramice piezoelectrice pe baza de (K,Na)NbO₃ dopate cu xmol% SmBO₃, respectiv GdBO₃ (unde B= Al, Co, Cr, Fe, Mn), unde x= 0.25, 0.5, 0.75, 1, 2.5, 5, studiul difractogramelor de raze X; imagistica prin microscopie electronica; comportamentul dielectric al materialelor la diferite frecvențe; determinarea marimilor piezoelectrice; calcularea coeficientului Poisson</p>	<p>Obiectivele intermediare ale proiectului au fost îndeplinite, urmînd în continuare proiectarea și construirea unui SUAS cu substrat piezoelectric pe baza de ceramica piezoelectrica în paralel proiectarea și realizarea dispozitivului de senzori pe baza de joncțiuni <i>p-n</i> de tipul. TiO₂-CuMnO₂, ZnO-CuMnO₂, care prezintă comportament de dioda, ambele abordări fiind utilizate la realizarea unui dispozitiv pentru detectia gazelor de sera (NO_x și CO_x).</p>
	<p>Raport de cercetare. Metode de obținere. Procedee de lucru. Participări conferințe, Schite de ansamblu și detaliu iluminarea Kohler adaptată microscopului LEVENHUK utilizat.</p>	<p>A fost realizată cu succes fotolitografierea unor electrozi interdigitali de Aur prin metoda fotorezistorului negativ; S-au obținut pelicule de substanță fotosensibilă pe substratul dorit, utilizînd tehnica „spin coating”; Imaginea electrozilor interdigitali a fost obținută utilizînd imaginea în negativ a obiectului dorit a fi fotolitografiat, respectiv metoda „wet etching” de realizare a imaginii în pozitiv pe substratul dorit (metoda de obținere); 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 duratei 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>
	<p>Realizarea prin fotolitografie a imaginii unui electrod interdigital; Realizarea utilizând metoda „spin coating” a substratului fotosensibil; Realizarea prin evaporare termică, utilizând Argintul, a substratului conductor electric; Stabilirea timpului optim de expunere, respectiv diluția optimă a fotorezistorului utilizat; Studiul influenței diluției substanței utilizate la corodarea chimică; Stabilirea diluției optime, respectiv a timpului optim de corodare chimică; Optimizarea aparaturii de laborator ce permite formarea imaginii folosind iluminarea Kohler; Obținerea unor electrozi interdigitali de tipul linie de întârziere; Testarea dispozitivelor SUAS utilizând analizorul spectral RIGOL DSA832.</p>	<p>Au fost realizate toate activitățile pentru atingerea obiectivului propus.</p>
	<p>Instalație de laborator de testare a senzorilor de detecție a gazelor. Dispozitive de senzori pentru detecția gazelor pe baza de heterojuncțiuni <i>p-n</i> de tipul TiO₂-CuMnO₂. și ZnO- TiO₂-CuMnO₂ care prezintă comportament de diodă. Senzori pentru detecția gazelor pe baza de heterojuncțiuni cu mai multe configurații: - sticlă-Au-TiO₂-CuMnO₂ - sticlă-Au-ZnO-CuMnO₂ -Ti-TiO₂- CuMnO₂ -Zn-ZnO-CuMnO₂ Dispozitiv pentru fotolitografierea "cost-effective" pe suport ceramic a unor circuite conductoare electrice</p>	<p>Au fost realizate toate activitățile pentru atingerea obiectivului propus.</p>

	miniaturale, utilizind iluminarea Kohler.	
--	---	--

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

Tip	Nr. Total 149	82 în 2019	37 în 2020	32 în 2021	18 în 2022
Documentații	5	2	2	1	-
Documentație privind realizarea tehnica a liofilizatoarelor	1	1			
Studii	16	9	2	4	1
Studii experimentale de laborator pentru obtinerea si caracterizarea materialelor de tipul: TiO ₂ , ZnO, CuMnO ₂ , (K,Na)NbO ₃ dopate cu xmol% SmBO ₃ , respectiv GdBO ₃ (unde B= Al, Co, Cr, Fe, Mn), unde x= 0.25, 0.5, 0.75, 1, 2.5, 5	5	5			
Studii - proiect tehnic de dimensionare a bateriei termice	1				1
Lucrări	133	61	32	25	15
Planuri	1	1	-	-	-
Plan realizare liofilizator	1	1			
Scheme	3	2	-	-	1
Scheme constructive liofilizator	2	2			
Schema constructiva complexa baterie termică	1				1
Altele asemenea (<i>se vor specifica</i>)	5	1	1	2	1
Lucrare de disertatie "Studii asupra sintezei oxizilor de WO ₃ pentru îmbunătățirea randamentului celulei solare pe bază de colorant sensibilizat" student Stefan Biru, Universitatea Politehnica Timișoara.	1	1			
Schite de ansamblu si detaliu iluminarea Kohler adaptata microscopului LEVENHUK utilizat	1		1		
Evenimente de mediatizare a științei și tehnologiei	2	-	-	2	
Obiect fizic - baterie termica	1				1

Din care:

4.2.1. Lucrări științifice publicate în jurnale cu factor de impact relativ ne-nul (2019-2022):

Nr.	Titlul articolului	Numele Jurnalului, Volumul, pagina nr.	Nume Autor	Anul publicării	Scorul relativ de influență al articolului	Numărul de citări ISI
1	Chemical reactivity driving	Fullerenes, Nanotubes and Carbon	Dudaș, Nicoleta	2019	1.411	-

	switchable molecular machines. A case of Bipyridine -Calixarene rotaxane	<i>Nanostructures</i> , Volume 27, Number 6, 3 June 2019, pp. 514-524 Taylor & Francis 27 (2019) 514-524; DOI: https://doi.org/10.1080/1536383X.2019.1612379 Print ISSN: 1536-383X Online ISSN: 1536-4046	A.; Putz, Mihai V.			
2	Atoms in Generalized Orbital Configurations: Towards Atom-Dedicated Density Functionals	<i>International Journal of Molecular Sciences</i> 20 (2019) 5943; DOI: 10.3390/ijms20235943 ISSN 1422-0067; CODEN: IJMCFK; ISSN 1661-6596 for printed edition	TOADER A.M., BUTA M.C., MAFTEI D., PUTZ M.V. (*), CIMPOESU F.	2019	2.247	-
3	The effect of partial substitution of Pd in LaMnO ₃ polycrystalline materials synthesized by sol-gel technique on the electrical performance	<i>Journal of Sol-Gel Science and Technology</i> December 2019, Volume 92, Issue 3, pp 537-545	Sfirloaga, P., Malaescu, I., Nicolae Marin, C., Vlazan, P.	2019	1.475	-
4	Complexation of [2-(2-bromo-phenylcarbonyl)phenoxy]acetic acid ethyl ester with β -cyclodextrin	<i>Rev.Roum.Chim.</i> , 64(10) acceptat spre publicare	Ioana M.C. Ienașcu, Mariana N. Ștefănuț, Mihai-Cosmin Pascariu, Iuliana M. Popescu, Adina Căta, Raluca Pop	2019	0.164	-
5	Thermal degradation of anthocyanin pigments in bilberry, blackberry and black mulberry extracts in the presence of some added food antioxidants	<i>Rev.Roum.Chim.</i> , 64(10), acceptat spre publicare	Adina Căta, Ioana M. C. Ienașcu, Cristian Tănasie, Mariana N.Ștefănuț	2019	0.164	-
6	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	Bumbăcilă B., Putz M.V.	2020	1.44	-
7	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	-
8	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	-
9	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	-
10	Topological Symmetry	<i>Symmetry</i>	Putz M.V.; Ori	2020	0.55	-

	Transition between Toroidal and Klein Bottle Graphenic Systems	12 (2020) 1233; DOI: 10.3390/sym12081233	O.			
11	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	-
12	Chemical Bonding by the Chemical Orthogonal Space of Reactivity	International Journal of Molecular Sciences MDPI 22 (2021) 223; DOI: 10.3390/ijms22010223 ISSN 1422-0067; CODEN: IJMCFK; ISSN 1661-6596 for printed edition	PUTZ M.V.	2020	0.55	
13	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	-
14	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; Miclău, M,	2020	AIS=0.518	-
15	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; Miclău, M.	2020	AIS=0.440	-
16	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	-
17	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	-
18	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	-
19	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	-
20	Face colorings and chiral face colorings of	<i>Fullerenes, Nanotubes and Carbon</i>	BALASUBRAMANIAN K., ORI O.,	2021	0.396	1

	icosahedral giant fullerenes: C80 to C240	<i>Nanostructures</i> 29, 1-12; DOI: 10.1080/1536383X.2020.1794853	CATALDO F., ASHRAFI A.R., PUTZ M.V.			
21	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	DUDAŞ N.A.; ORI O., PUTZ M.V.	2021	0.396	-
22	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	-
23	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: 10.2174/1573409916666200625141309	PETRESCU, A.M.; PUTZ M.V.; IFRIM F.C.; ILIA, G.; PAUNESCU, V.	2021	0.228	-
24	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	-
25	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.; PETRIŞOR I.I.	2021	0.396	-
26	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. Ianas)) MariaPoienar Paula Sfirloaga	2021	5.316	-
27	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	-
28	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
29	Development of a new "n-p" heterojunction based on TiO ₂ and CuMnO ₂	<i>Materials Chemistry and Physics</i> , 272 124999	Carmen Lazau, Maria Poienar, Corina Orha,	2021	FI=4.094	0

	synergy materials		Daniel Ursu, Mircea Nicolaescu, Melinda Vajda, Cornelia Bandas			
30	Fabrication of a UV Photodetector Based on <i>n</i> -TiO ₂ / <i>p</i> -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
31	α-MnO ₂ Nanowire Structure Obtained at Low Temperature with Aspects in Environmental Remediation and Sustainable Energy Applications	<i>Appl. Sci.</i> 2022 , 12, 6821	Taranu, B.-O.; Novaconi, S.D.; Ivanovici, M.; Gonçalves, J.N.; Rus, F.S.	2022	0.923	0
32	Simultaneous Precipitation and Electrodeposition of Hydroxyapatite Coatings at Different Temperatures on Various Metal Substrates	<i>Coatings</i> 2022 , 12, 288	Taranu, B.-O.; Ianasi, P.; Rus, S.F.; Bucur, A.I.	2022	1.000	7
33	Water splitting studies in alkaline medium using graphite electrodes modified with transition metal oxides and compositions containing them	<i>Studia Universitatis Babes-BolyaiChemia</i> , 67, 79-95	B.-O. Taranu, P. Vlazan, A. Racu	2022	0.123	0
34	Challenging the HSAB principle on molecular machines' precursors. DOI: 10.1080/1536383X.2021.1877666	Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures 29:8 (2021) 626-637;	DUDAȘ N.A.; ORI O., PUTZ M.V. (*)	2021	0,633	207 views
35	Face colorings and chiral face colorings of icosahedral giant fullerenes: C80 to C240.	Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures 29 (2021) 1-12;	BALASUBRAMANIAN K., ORI O., CATALDO F., ASHRAFI A.R., PUTZ M.V.	2021	0,633	127 views 5 citations by WoS
36	Chemical Bonding by the Chemical Orthogonal Space of Reactivity	International Journal of Molecular Sciences 22 (2021) 223	PUTZ M.V.	2021	1,18	4 citations by WoS
37	Ld/Mm+ Simulation of Some Aristolochic and Humic Acids Species Coupled in Periodic Box with Water	Current Computer-Aided Drug Design 17/6 (2021) 708-724;	PETRESCU, A.M.; PUTZ M.V. (*); IFRIM F.C.; ILIA, G.; PAUNESCU, V.	2021	0,448	
38	Quantum fluctuations on matriceal graphenic heterojunctions e-circuits.	Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures 30:7 (2022) 751-759;	PUTZ, M.V.; & BUZATU D.L.	2022	0,633	32 views

39	Enhanced photocatalytic activity of rare earth doped lanthanum manganite nanomaterials in the degradation of endocrine disruptors, manuscript revizuit	Catalytic Today. 10.1016/j.cattod.2022.05.011	Šojić Merkulov D., Vlazan P., Poienar M., Bognár S., Sfirloaga P.	2022	6.766	
40	Novel Chloro-Substituted Salicylanilide Derivatives and their β -Cyclodextrin Complexes	Biomedicines, 10, 1740 https://doi.org/10.3390/biomedicines10071740	Ienașcu I.M.C.; Căta A.; Ștefănuț M.N.; Popescu I.M.; Rusu G.; Sfirloagă P.; Ursu D.; Moșoarcă C.; Dabici A.; Danciu C.; Muntean D.; Pop R.	2022	FI=4.757 (Q2)	
41	Self-Powered Photodetector Based on FTO/n-TiO ₂ /p-CuMnO ₂ Transparent Thin Films	Materials, 15, 5229. https://doi.org/10.3390/ma15155229 , Journal Impact Factor: 3.748	Carmen Lăzău, Nicolaescu Mircea, Corina Orha, Șerban Viorel, Bandas Cornelia,	2022	1.822	
42	Development of the Zn-ZnO(Nw)/CuMnO ₂ Heterojunction by Low Temperature Zn Foil Oxidation for Gas Sensor Fabrication	Coatings, 2022, 12, 1630. https://doi.org/10.3390/coatings12111630 Journal Impact Factor: 3.236	Mircea Nicolaescu, Cornelia Bandas, Corina Orha, Violeta Purcar, Carmen Lazau	2022	1	

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

Nr. crt.	Titlul articolului, Manifestarea științifică, Volumul, Pagina nr.	Nume Autor	An apariție	Nr. citări ISI
1	High aspect ratio hydroxyapatite for low density aerogels <i>25th International Symposium on Analytical and Environmental Problems (ISAEF 2019), Proceedings of 25th ISAEF, pg 263</i>	Alexandra Ioana Bucur, Bogdan-Ovidiu Taranu, Iuliana Sebarchievici, Cristina Mosoarca, Mihai Cosmin Pascariu, Corina Orha, Radu Banica	2019	-
2	Potential biomedical applications of some hydroxyapatite materials <i>ARAD ACADEMIC DAYS, The XXIXth Edition, Arad, mai 2019</i> (http://www.zileleacademicaradene.ro/)	Bucur Alexandra Ioana, Taranu Bogdan Ovidiu, Sebarchievici Iuliana, Pascariu Mihai Cosmin, Mosoarca Cristina, Banica Radu	2019	-
3	Hydroxyapatite – research directions at INCEMC <i>Environment Day, 5 Iunie 2019, ICER Timișoara</i>	Bucur Alexandra Ioana, Taranu Bogdan Ovidiu, Sebarchievici Iuliana, Banica Radu, Bucur Raul Alin	2019	-
4	Study about the Active/Reactive Power Balance of a 110/6 kV Transformer <i>2019 Electric Power Quality and Supply Reliability</i>	Bogdan Filip, Doru Vatau, Flaviu Mihai Frigura-Iliasa, Mihaela Frigura-Iliasa, Mirela Iorga, Emil Cazacu	2019	-

	<i>Conference, 12-15 iunie 2019, Hiiuma Island, Estonia</i>			
5	Computer Model for Supervisory Control of Discrete Event Systems in Electrical Industry Manufacturing using PLCs <i>2019 Electric Power Quality and Supply Reliability Conference, 12-15 iunie 2019, Hiiuma Island, Estonia</i>	Adrian Flavius Olariu, Hannelore Filipescu, Flaviu Mihai Frigura-Iliasa, Lia Dolga, Marius Mirica, Mihaela Frigura-Iliasa	2019	-
6	Human Machine Interface for a Photovoltaic Electricity Station <i>International Conference on Information and Digital Technologies 2019, 25-27 iunie 2019, Zilina, Slovacia</i>	Calin Mihai Vinga, Francisc Demeter, Vlad Vatau, Flaviu Mihai Frigura-Iliasa, Marius Mirica, Mirela Iorga	2019	-
7	Power Management and Control for a Photovoltaic Electricity Station <i>International Conference on Information and Digital Technologies 2019, 25-27 iunie 2019, Zilina, Slovacia</i>	Adrian Paun, Radu Vasil, Lia Dolga, Hannelore Elfride Filipescu, Flaviu Mihai Frigura-Iliasa, Florin Ionel Balcu	2019	-
8	Supervisory Control of Discrete Event Systems in Manufacturing Industry <i>The 2nd International Conference of Intelligent Robotic and Control Engineering (IRCE 2019), 26-29 August, 2019, Singapore</i>	Nicolae Iacobici-Luca, Francisc Demeter, Flaviu Mihai Frigura-Iliasa, Lia Dolga, Hannelore Filipescu, Mirela Iorga	2019	-
9	Digital Image Processing and Recognition in Industrial and Public Environments <i>The 2nd International Conference of Intelligent Robotic and Control Engineering (IRCE 2019), 26-29 August, 2019, Singapore</i>	Radu Vasil, Flaviu Mihai Frigura-Iliasa, Mirela Iorga, Hannelore Filipescu, Marius Rogobete, Madlena Nen	2019	-
10	The Influence of the Electronic Components Located on the Front End of RKE Receivers for Passenger Cars <i>4th International Conference on Intelligent Transportation Engineering (ICITE 2019), 5-7 September, 2019, Singapore</i>	Radu Vasil, Flaviu Mihai Frigura-Iliasa, Mirela Iorga, Florin Alexa, Lia Dolga, Hannelore Filipescu	2019	-
11	PLC Commanded Intelligent Logistics Model based on Discrete Event Systems <i>4th International Conference on Intelligent Transportation Engineering (ICITE 2019), 5-7 September, 2019, Singapore</i>	Elvis Dogaru, Flaviu Mihai Frigura-Iliasa, Mirela Iorga, Lia Dolga, Hannelore Filipescu, Mihaela Frigura-Iliasa	2019	-
12	Computer Based Algorithm for Optimizing Design and Construction of Large Transport Infrastructure Objectives <i>4th International Conference on Intelligent Transportation Engineering (ICITE 2019), 5-7 September, 2019, Singapore</i>	Mihaela Frigura-Iliasa, Flaviu Mihai Frigura-Iliasa, Marius Mirica, Radu Vasil, Francisc Demeter, Mirela Iorga	2019	-
13	Didactic Procedure and Equipment for the Study of Low Voltage Power Quality Parameters <i>The 12th Annual International Conference of Education, Research and Innovation (ICERI 2019),</i>	C.M. Vinga, F. Pfeifer, H.E. Filipescu, N. Todea, F.M. Frigura-Iliasa, M. Iorga	2019	-

	Sevilla, Spania, 11-13 Nov. 2019			
14	Study about the Protection of Automotive Electric Equipment by using Metal Oxide Varistors <i>The 11th International Conference on Electrical and Electronics Engineering (ELECO 2019), Bursa, Turcia, 28-30 Nov. 2019</i>	Florian F. Pfeifer, Hannelore E. Filipescu, Flaviu M. Frigura-Iliasa, Valer Dolga and Mirela Iorga	2019	-
15	Study about the Reconstruction of Parts for Automotive Electronics by using 3D Scanning Techniques <i>The 11th International Conference on Electrical and Electronics Engineering (ELECO 2019), Bursa, Turcia, 28-30 Nov. 2019</i>	Nicolae Todea, Lia Dolga, Flaviu M. Frigura-Iliasa, Valer Dolga and Mirela Iorga	2019	-
16	Orbital Clustering Method for Knowledge Management of Innovations <i>NANO MOD 2019, Book of Abstracts, pp. 16-17</i>	Mihai V. Putz	2019	-
17	Optimizing device of logical matrices towards semiconductivity <i>NANO MOD 2019, Book of Abstracts, pp. 48-49</i>	Doru Buzatu, Paula Svera, Mihai V. Putz	2019	-
18	Chemical Reactivity Driving Switchable Molecular Machines <i>NANO MOD 2019, Book of Abstracts, pp. 51-53</i>	Nicoleta A. Dudaș, Mirela I. Iorga, Mihai V. Putz	2019	-
19	Green's Function In Modeling Graphenic Chemical Bonds <i>NANO MOD 2019, Book of Abstracts, pp. 55-57</i>	Marina A. Tudoran, Mihai V. Putz	2019	-
20	2019 International Symposium in Management (SIM2019) https://trivent-publishing.eu/old/sim2019/ CLUSTERING BY NANOTECH: THE TUNNELING APPROACH. In: Gabriela Prostean, Juan José Lavios Villahoz, Laura Brancu, Gyula Bakacsi (Eds.) Innovation in Sustainable Management and Entrepreneurship. Proceedings of the 2019 International Symposium in Management (SIM2019), Springer Nature (Cham, Switzerland) AG 2020; Springer Proceedings in Business and Economics (ISSN 2198-7246; indexed by Publons: https://publons.com/journal/433516/springer-proceedings-in-business-and-economics/ ; CitEc: http://citec.repec.org/s/2017/sprprbuec.html ; ScienceGate: https://www.sciencegate.app/source/874644489;https://www.springer.com/series/11960]. Chapter 43, pp. 575-590. URL: https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-030-44711-3_43	Putz M.V., Petrisor I.	2019	-
21	Photovoltaic performance of p-type dye-sensitized solar cells based on Cu ₂ O particles with different morphologies	Daniel Ursu, Anamaria Dabici, Melinda Vajda, Cristian Casut, Daiana	2019	-

	<i>New trends and strategies in the chemistry of advanced materials with relevance in biological systems, technique and environmental protection, Timisoara, Romania</i>	Albulescu, Narcis Duteanu, Marinela Miclau		
22	Investigation of optical and magnetical properties of YFeO_3 and $\text{YFeO}_3:\text{Er}$ <i>TIM 19 Physics Conference, Timisoara, Romania</i>	Andrei Racu, Vlad Socoliuc	2019	-
23	Hydrothermal synthesis of the mixed-phases based on Mn for lithium ion battery application <i>25th International Symposium On Analytical and Environmental Problems, Szeged, Hungary</i>	Dabici Anamaria, Ursu Daniel, Vajda Melinda, Miclau Marinela, Casut Cristian, Albulescu Daiana	2019	-
24	Conformational analysis of organo-silicon derivates attached on superparamagnetic iron oxide (Fe_3O_4) <i>25th International Symposium On Analytical and Environmental Problems, Szeged, Hungary</i>	Horatiu Moldovan, Marius Chirita, Liviu Mocanu,	2019	-
25	The study of some electrical properties of Cu_2O compound by ab-initio methods <i>25th International Symposium On Analytical and Environmental Problems, Szeged, Hungary</i>	Marinela Miclau, Daniel Ursu, Vajda Melinda, Liviu Mocanu	2019	-
26	Investigation of thermal behavior for materials based on lanthanum manganite with nitrogen addition <i>CEEC-TAC5 & Medicta2019, 27-30 August 2019, Roma, Italy</i>	Paula Sfirloaga, Gabriela Vlase, Paulina Vlazan	2019	-
27	Phase transitions in perovskite-type manganites and effect of Ag-doping on its physico-chemical properties <i>CEEC-TAC5 & Medicta2019, 27-30 August 2019, Roma, Italy</i>	Paula Sfirloaga, Titus Vlase, Dan Rosu, Paulina Vlazan	2019	-
28	Electrochemical behaviour of LaMnO_3 -modified graphite electrodes <i>25th International Symposium on Analytical and Environmental Problems (ISAEP 2019) Szeged, Hungary 7-8 October 2019</i>	Bogdan-Ovidiu Taranu, Iuliana Sebarchievici, Paulina Vlazan, Maria Poienar, Paula Sfirloaga	2019	-
29	Electro-oxidation of ascorbic acid on perovskite-modified electrodes <i>25th International Symposium on Analytical and Environmental Problems (ISAEP 2019) Szeged, Hungary 7-8 October 2019</i>	Iuliana Sebarchievici, Bogdan-Ovidiu Taranu, Stefania Florina Rus, Paulina Vlazan, Maria Poienar, Paula Sfirloaga	2019	-
30	Ag doped manganite materials: morpho-structural properties and electrical performance <i>TIM19 Physiscs Conference, 29-31 May 2019, Timisoara, Romania</i>	Sfirloaga Paula, Malaescu Iosif, Marin Catalin, Poienar Maria, Ursu Daniel, Mosoarca Cristina, Vlazan Paulina	2019	-
31	Effect of Fe-doping on the structural, morphological and electrical properties of LaMnO_3 <i>TIM19 Physiscs Conference, 29-31 May 2019, Timisoara, Romania</i>	Sfirloaga Paula, Malaescu Iosi, Marin Catalin, Barvinschi Paul, Poienar Maria, Vlazan Paulina	2019	-

32	Evaluation of anthocyanin stability in red onion skin extract <i>The Second International Conference on Life Sciences, Timisoara, România, 23-24.05</i>	Adina Căta, Mariana N. Ștefănuț, Ioana M.C. Ienașcu	2019	-
33	Novel hydrazone/ β -cyclodextrin complex. Synthesis and characterization <i>The Second International Conference on Life Sciences, Timisoara, România, 23-24.05.</i>	Ienașcu, I.M.C., Căta A., Ștefănuț, M.N., Pascariu, M.C., Rusu, G., Sfirloagă P., Moșoarcă C., Popescu, I.M.	2019	-
34	UV-VIS techniques for antioxidant capacities evaluation of some brassicaceae extracts <i>21st DKMT Euroregion Conference on Environment and Health, Novi Sad, Serbia, 6-8.06.</i>	Ștefănuț M.N., Căta A.E., Ienașcu I.M.C.	2019	-
35	Influence of some natural antioxidants on the anthocyanin stability <i>21st DKMT Euroregion Conference on Environment and Health, Novi Sad, Serbia, 6-8.06.</i>	Căta, A., Ștefănuț, M.N., Ienașcu, I.M.C.	2019	-
36	Synthesis and characterization of novel β -cyclodextrin-hydrazone complex <i>21st DKMT Euroregion Conference on Environment and Health, Novi Sad, Serbia, 6-8.06.</i>	Ienașcu, I.M.C., Căta A., Rusu G., Ștefănuț, M.N., Sfirloagă P., Moșoarcă C., Popescu, I.M.	2019	-
37	New salicylanilide derivatives tested for antimicrobial activity <i>21st DKMT Euroregion Conference on Environment and Health, Novi Sad, Serbia</i>	Ienașcu, I.M.C., Obistioiu D., Popescu I.M., Căta A., Ștefănuț, M.N.	2019	-
38	Antibacterial Activity Evaluation of Some New 5-Chloro-2-Hydroxy-Benzamide Derivatives <i>21st Romanian International Conference on Chemistry and Chemical Engineering, Constanta-Mamaia, ROMANIA - September 4 – 7</i>	Ienașcu, I.M.C., Obistioiu D., Popescu, I.M., Căta A., Ștefănuț M.N.	2019	-
39	Different Methods for Extraction of Biological Active Compounds from some <i>Brassicaceae</i> Vegetables <i>21st Romanian International Conference on Chemistry and Chemical Engineering, Constanta-Mamaia, ROMANIA - September 4 – 7</i>	Mariana Nela Ștefănuț, Adina Căta, Ioana Maria Carmen Ienașcu	2019	-
40	Analysis of Salicin in Some Willow Bark Food Supplements <i>21st Romanian International Conference on Chemistry and Chemical Engineering, Constanta-Mamaia, ROMANIA - September 4 – 7</i>	Adina Căta, Mariana N. Ștefănuț, Ioana M.C. Ienașcu	2019	-
41	Partial characterization of extracts from some <i>Brassicaceae</i> vegetables <i>25th International Symposium on Analytical and Environmental Problems, 7-8 October 2019, Szeged, Hungary, Proceeding ISAEP 2019, p.244</i>	Mariana Nela Ștefănuț, Adina Căta, Ioana Maria Carmen Ienașcu	2019	-
42	Determination of salicin content in food supplements containing willow bark	Adina Căta, Mariana N. Ștefănuț, Ioana M.C. Ienașcu	2019	-

	<i>25th International Symposium on Analytical and Environmental Problems, 7-8 October 2019, Szeged, Hungary, Proceeding ISAEF 2019, p.119</i>			
43	Antimicrobial effect of some new salicylamide derivatives <i>25th International Symposium on Analytical and Environmental Problems, 7-8 October 2019, Szeged, Hungary, Proceeding ISAEF 2019, p.147</i>	Ienașcu, I.M.C., Căta, A., Ștefănuț M.N., Obistioiu, D., Popescu, I.M.	2019	-
44	(K,Na)NbO ₃ based environmental friendly piezoceramics <i>TIM 19 Physics Conference Timisoara, Romania, 29 - 31 mai 2019</i>	Raul Alin Bucur, Iuliana Farkas, Alexandra Ioana Bucur, Corina Orha, Carmen Lazau, Melinda Vajda	2019	-
45	Synthesis and characterization of mesoporous TiO ₂ <i>TIM 19 Physics Conference, Timisoara, Romania, 29 - 31 May 2019</i>	Carmen Lazau, Corina Orha, Cornelia Bandas, Mircea Nicolaescu, Melinda Vajda, Mina Popescu	2019	-
46	Synthesis and structural characterization of black TiO ₂ <i>New trends and strategies in the chemistry of advanced materials with relevance in biological systems, technique and environmental protection, 12th Edition, June 06-07, 2019, Timisoara, ROMANIA</i>	Mircea Nicolaescu, Carmen Lazau, Corina Orha, Cornelia Bandas, Daniel Ursu, Melinda Vajda, Mina Ionela Popescu	2019	-
47	Synthesis and characterization of sensitive components: n- type binary oxides (TiO ₂ , ZnO) and p- type crednerite (CuMnO ₂) for amperometric sensor <i>25th International Symposium on Analytical and Environmental Problems (ISAEF 2019) Szeged, Hungary 7-8 October 2019, pag.104</i>	Cornelia Bandas, Maria Poienar, Paulina Vlazan, Corina Orha, Daniel Ursu, Carmen Lazau	2019	-
48	Highly electroconductive porous structures coated with silver nanowires; PhysicsTIM20 Conference Timișoara, România.	Petrica Linul, Radu Banica, Oana Alexandra Grad, Emanoil Linul, Nicolae Vaszilcsin	2020	-
49	Low Density Hydroxiapatite Tridimensional Structures; PhysicsTIM20 Conference Timișoara, România.	Alexandra Ioana Bucur, Bogdan Ovidiu Taranu, Radu Banica, Petrica Linul, Cosmin Pascariu	2020	-
50	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	-
51	<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,	Iorga M.I., Dudaș N., Putz M.V.	2020	-

	Switzerland) ♣ URL: https://doi.org/10.1007/978-3-030-55757-7_21			
52	<i>Quantum Metrological Matrices for Sustainable Graphenronics</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	-
53	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	-
54	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	-
55	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	-
56	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	
57	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	
58	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., Vaszilcsin C., Ienașcu I.M.C.	2020	
59	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 ISAEP 2020, p.103	Adina Căta, Ioana M. C. Ienașcu, Mariana N. Ștefănuț	2020	-
60	Synthesis and characterization of some n-(4-chloro-phenyl)-2-hydroxy-benzamide derivatives, The 26 th International Symposium on Analytical and	Ioana M. C. Ienașcu, Adina Căta, Cristina Moșoarcă, Iuliana M. Popescu, Mariana	2020	-

	Environmental Problems Szeged, Hungary, November 23-24.11.2020, Proceedings ISAEF 2020, p.164	N. Ștefănuț		
61	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	-
62	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	-
63	Synthesis and characterization of “n-n” heterojunction based on TiO ₂ -ZnO materials, 3 RD INTERNATIONAL CONFERENCE ON EMERGING TECHNOLOGIES IN MATERIALS ENGINEERING 29-30 October, Bucharest, Romania	Mircea Nicolaescu, Paulina Vlazan, Cornelia Bandas, Corina Orha, Carmen Lazau, Viorel Serban	2020	-
64	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	-
65	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	-
66	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	-
67	Graphenic heterojunction, 2 nd international exhibition InventCor, 16-18.12.2021, Deva, România.	PUTZ M.V.; BUZATU D. L.	2021	-
68	Anthocyanin extracts from different plant matrices as potential natural food dyes, <i>CHIMIA 2020 - New Trends in Applied Chemistry</i> , 27-29 mai 2021, Constanța, România.	Căta A., Ienașcu I.M.C., Ștefănuț M.N.	2021	-
69	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	-
70	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., Vazsilcsin C., Ienașcu I.M.C.	2021	-
71	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	-
72	Novel inclusion complex of β-cyclodextrin and [2-(2-chlorophenylcarbamoyl)-phenoxy]-acetic acid	Ienașcu I.M.C., Căta A., Rusu G., Ștefănuț M.N., Sfirloagă	2021	-

	ethyl ester. The 27 th <i>International Symposium on Analytical and Environmental Problems</i> , 22-23 noiembrie 2021, Szeged, Ungaria, p. 142.	P., Moșoarcă C., Dabici A., Ursu D.		
73	Microencapsulation of some glucosinolates from Brassicafamily 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., Șfirloagă P., Moșoarcă C., Ursu D., Dabici A., Căta A., Ienașcu I.M.C.	2021	-
74	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	-
75	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	-
76	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	-
77	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 978-963-306-835-9, pagina 161	Corina Orha, Mina Ionela Popescu, Cornelia Bandas, Mircea Nicolaescu, CarmenLazau, Florica Manea	2021	-
78	Effect of cooling rate in the Hydrothermal synthesis on crystalline structures an morphologies of bismuth ferites, <i>Physics Conference TIM 20</i> , Timisoara, Romania	Casut Cristian, Miclau Marinela, Malaescu Iosif	2021	-
79	Manganese dioxide as efficient catalyst for pollution reduction in aqueous medium, coautori la Conferinta Internationala „11th Edition of International Conference on Catalysis, Chemical Engineering and Technology (Online Event)” Online la Tokyo, May 16-17, 2022 pag 40	Rus Florina, Novaconi Stefan, Vlazan Paulina si Ivanovici Madalina	2022	-
80	FABRICATION OF TIO ₂ PHOTOCATALYST USING PLD TECHNIQUE, „Conferinta Nationala de Chimie - CNChim - 2022 ” din Caciulata, Romania, 04-07 octombrie 2022 .	Rus SF si Herklotz Andreas	2022	-
81	Preliminary water splitting studies on Ag and graphite modified porous structures, as such or decorated with Pt particles, The 27th International Symposium on Analytical and Environmental Problems, 22-23 November 2021, Szeged, Hungary, Proceedings of the 27th International Symposium on Analytical and Environmental Problems, 331-335	B.-O. Taranu, P. Linul, R. Banica	2022	-
82	Electrochemical durability of magnetite and birnessite modified electrodes with potential application in water splitting, The 27th International Symposium on Analytical and Environmental Problems, 22-23 November 2021, Szeged, Hungary, Proceedings of the 27th International Symposium on Analytical and Environmental Problems, 336-339	B.-O. Taranu, P. Vlazan, I. Taranu	2022	-

83	Tridimensional hydroxyapatite structures for drug delivery applications, The Academic Days of Arad 32nd Edition, May 25-29, 2022, Arad, Romania, Book of Abstracts, 190	A.I. Bucur, B.O. Taranu, M.-C. Pascariu, C. Mosoarca, R.A. Bucur, C. Orha, R. Banica	2022	-
84	On The Valence Nature Of The Chemical Bond: The Pauling Bondonic Qbits. Math/Chem/Comp 2022 – 33rd MC2 Conference, Inter University Centre Dubrovnik, 6 – 10 June 2022; Book of Abstracts, Published by Croatian Chemical Society, Editors: Hrvoj Vančik, Jerzy Cioslowski, Danijel Namjesnik; Zagreb, ISBN: 978-953-8334-03-0, p. 25 (https://mcc.hkd.hr/index.html)	Putz, M.V.	(2022)	-
85	Preparation and characterization of the inclusion complexes of salicin with α - cyclodextrin and γ -cyclodextrin, <i>The 28th International Symposium on Analytical and Environmental Problems</i> , 14-15.11.2022, Szeged, Ungaria	Căta A., Ienașcu I.M.C., Ștefănuț M.N., Ursu D., Moșoarcă C., Rus Ș., Orha C., Dabici A.	2022	-
86	Effect of β -cyclodextrin complexation on the antibacterial activity of some salicylanilide esters, <i>The 28th International Symposium on Analytical and Environmental Problems</i> , 14-15.11.2022, Szeged, Ungaria	Ienașcu I.M.C., Căta A., Ștefănuț M.N., Danciu C., Muntean D., Pop R.	2022	-
87	Encapsulation of some glucosinolates from cabbage and broccoli hydroethanolic extracts in 2-isopropyl-cyclodextrin and γ -cyclodextrin, <i>The 28th International Symposium on Analytical and Environmental Problems</i> , 14-15.11.2022, Szeged, Ungaria	Ștefănuț M.N., Bănică R., Moșoarcă C., Ursu D., Căta A., Ienașcu I.M.C.	2022	-
88	Biological properties of some Romanian <i>Brassicaceae</i> Extracts, <i>The Academic Days of Arad</i> , XXXII-nd Edition, 25-29.05.2022, Arad, Romania	Ienașcu I.M.C., Ștefănuț M.N., Căta A., Muntean D., Buda V., Danciu C., Licker M., Pop R.	2022	-
89	Analysis of salicin in some willow bark food supplements, <i>The Academic Days of Arad</i> , XXXII-nd Edition, 25-29.05.2022, Arad, Romania	Căta A., Ștefănuț M.N., Ienașcu I.M.C., Ladașiu C.	2022	-
90	Novel [2-(4-chloro-phenylcarbamoil)-phenoxy]-acetic acid ethyl ester: β -cyclodextrin inclusion complex, <i>12th International Conference on Materials Science & Engineering</i> , BRAMAT 2022, 9-12.03.2022, Brașov, Romania	Ienașcu I.M.C., Căta A., Rusu G., Ștefănuț M.N., Sfirloagă P., Moșoarcă C., Dabici A., Ursu D.	2022	-
91	<i>The 9th International Conference on Advanced Materials and Structures, AMS 2022. Timisoara, Romania</i> , "Synthesis of nanoporos copper decorate with copper oxide nanowire by dealloying and thermal oxidation of CuZrAl amorphous ribbons"	Mircea Nicolaescu, Petru Hididis, Coet Celestin, Damien Brierec, Cosmin Codrean, Melinda Vajda, Corina Orhab, Cornelia Bandas, Carmen Lazau, Mircea Voda, Viorel Aurel Serban,	2022	-
92	<i>International semiconductor conference CAS, Poiana Brasov, Romania, 2022</i> "A Facile Dip-Coating Process Graphene-TiO ₂ on Titanium Foil for Hybrid Electrode Fabrication"	Carmen Lazau, Cornelia Bandas, Mircea Nicolaescu, Corina Orha, Aniela Pop	2022	-
93	<i>International conference on emerging technologies in materials engineering EmergeMAT, Bucharest, Romania, 2022</i> , "Synthesis of ZnO-reduced graphene oxide hybrid materials via dip-coating method for pollutants removal	Cornelia Bandas, Mircea Nicolaescu, Corina Orha, Carmen Lazau	2022	-
94	<i>12th International conference on Materials Science</i>	Mircea Nicolaescu, Petru	2022	-

	& Engineering, BRAMAT 2022 "Synthesis of nanoporous copper by dealloying CuZrAl and CuZrAlAg amorphous ribbons in acidic solution"	Hididis, Cosmin Codrean, Iosif Hulka, Melinda Vajda, Corina Orha, Bandas Cornelia, Carmen Lazau , Viorel Aurel Serban		
95	28th International Symposium on Analytical and Environmental Problems (ISAEP 2022), Szeged, Hungary, 2022 "Design and fabrication of an surface acoustic wave sensor for greenhouse gas emission monitoring"	Bucur Raul Alin, Farkas Iuliana	2022	-

4.2.3. Lucrări publicate în alte publicații relevante:

Nr.	Titlul articolului	Numele Jurnalului, Volumul, Pagina nr.	Nume Autor	Anul publicării
1	Effect of Fe-Doping on the Structural, Morphological and Electrical Properties of LaMnO3	AIP Conference - American Institute of Physics	Paula Sfirloaga, Iosif Malaescu, Catalin Nicolae Marin, Maria Poienar, Paulina Vlazan	2019
2	Extracts from some Romanian Brassicaceae vegetables	Ovidius University Annals of Chemistry, Constanta, Romania	Mariana Nela Ștefănuț, Adina Căta, Radu Bănică, Raluca Pop, Ioana Maria Carmen Ienașcu	2020
3	Synthesis of nanoporous copper by dealloying CuZrAl and CuZrAlAg amorphous ribbons in acidic solution,"	Materials Today-Proceedings, /doi.org/10.1016/j.matpr.2022.10.050	Mircea Nicolaescu, Petru Hididis, Cosmin Codrean, Iosif Hulka, Melinda Vajda, Corina Orha, Cornelia Bandas, Carmen Lazau, Viorel Aurel Serban,	2022
4	Comparative Morpho-Structural and Electrochemical Characterization of the La and F Doped Porous Ti/SnO2 Dimensionally Stable Anodes	International semiconductor conference CAS, IEEE	Corina Orha, Mircea Nicolaescu, Cornelia Bandas, Carmen Lazau, Anamaria Baci, Florica Manea,	2022
5	A Facile Dip-Coating Process Graphene-TiO2 on Titanium Foil for Hybrid Electrode Fabrication	International semiconductor conference CAS, IEEE	Carmen Lazau, Cornelia Bandas, Mircea Nicolaescu, Corina Orha, Aniela Pop	2022
6	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

THE FOLLOWING CHAPTERS IN:

PUTZ M.V. (Editor)

NEW FRONTIERS IN NANO-CHEMISTRY: CONCEPTS, THEORIES, AND TRENDS, VOLUME 1:

STRUCTURAL NANO-CHEMISTRY

Apple Academic Press & CRC Press, Toronto-New Jersey, Canada-USA

pp. 526+index;

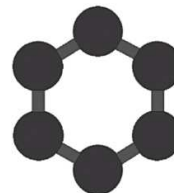
ISBN: 978-1-771887-77-9

♣ URL: <http://www.appleacademicpress.com/new-frontiers-in-nanochemistry-concepts-theories-and-trends-volume-1-structural-nanochemistry-/9781771887779>

Ch. 4. Aromaticity

(pp. 29-43)

PUTZ M.V., TUDORAN M.A.



Ch. 6. Bondonic Theory

(pp. 49-58)

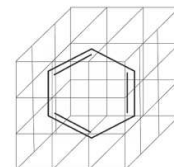
PUTZ M.V.

$$M_B = \frac{\hbar^2}{2E_{bond} X_{bond}^2}$$

Ch. 7. Chemical Modeling

(pp. 59-65)

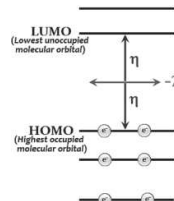
DUDA-SEIMAN C., DUDA-SEIMAN D., **PUTZ M.V.**



Ch. 9. Chemical Orthogonal Space

(pp. 81-93)

PUTZ M.V.



Ch. 10. Electrochemical Impedance

(pp. 95-110)

IORGA M.I., **PUTZ M.V.**



Ch. 14. Electron Localization Function

(pp. 133-142)

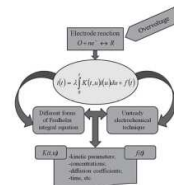
PUTZ M.V.

$$\eta^{MSECHI}(r) = \left\{ \sec h \left[\sqrt{2} \frac{g(r)}{h(r)} \right] \right\}^{3/2}$$

Ch. 18. Fredholm Integral Equation in Electrochemistry

(pp. 201-220)

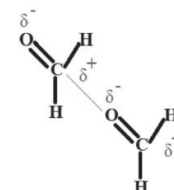
IORGA M.I., **PUTZ M.V.**



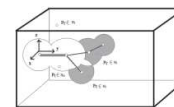
Ch. 24. Intermolecular Force Parameters

(pp. 259-269)

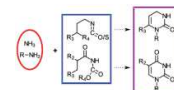
BUMBĂCILĂ B., **PUTZ M.V.**



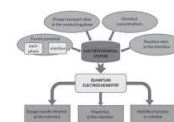
Ch. 31. Monte Carlo Molecular Simulations
(pp. 353-363)
BUMBĂCILĂ B., **PUTZ M.V.**



Ch. 41. Pyrimidines
(pp. 445-470)
DUDAȘ N.A., **PUTZ M.V.**



Ch. 43. Quantum Electrochemistry
(pp. 475-492)
IORGA M.I., **PUTZ M.V.**



THE FOLLOWING CHAPTERS IN:

PUTZ M.V. (Editor)

NEW FRONTIERS IN NANOCHEMISTRY: CONCEPTS, THEORIES, AND TRENDS, VOLUME 2: TOPOLOGICAL NANOCHEMISTRY

Apple Academic Press & CRC Press, Toronto-New Jersey, Canada-USA

pp. 606+index;

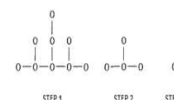
ISBN: 978-1-771887-78-6

♣ URL: <http://www.appleacademicpress.com/new-frontiers-in-nanochemistry-concepts-theories-and-trends-volume-2-topological-nanochemistry-/9781771887786>

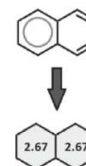
Ch. 2. Bondonic Topo-Reactivity
(pp. 19-29)
PUTZ M.V., TUDORAN M.A.

$$\chi_{\text{Bondonic-topo-reactivity}} = \frac{\chi_{\text{Bondonic-topo-reactivity}}}{\sum_{\text{Type-of-bond}} \chi_{\text{Type-of-bond}}}$$

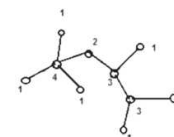
Ch. 6. Centric Index: Topological Shape
(pp. 83-94)
BUMBĂCILĂ B., **PUTZ M.V.**



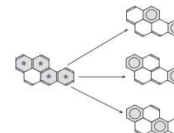
Ch. 8. Clar Structure
(pp. 119-127)
TUDORAN M.A., **PUTZ M.V.**



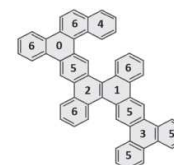
Ch. 9. Connectivity Index
(pp. 129-139)
BUMBĂCILĂ B., **PUTZ M.V.**



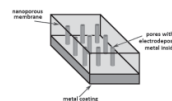
Ch. 17. Fries Structure
(pp. 207-217)
TUDORAN M.A., **PUTZ M.V.**



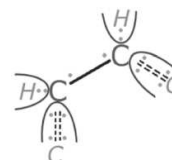
Ch. 21. Kekulé Structure
(pp. 255-)
TUDORAN M.A., **PUTZ M.V.**



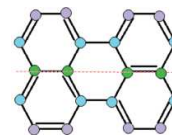
Ch. 31. Powder Electrodeposition
(pp. 347-365)
MIRICA M.C., TUDORAN M.A., **PUTZ M.V.**



Ch. 35. Specific Adjacency in Bonding
(pp. 399-411)
PUTZ M.V., TUDORAN M.A.



Ch. 41. Topological Reactivity
(pp. 465-476)
PUTZ M.V., ORI O., PUTZ A.-M., TUDORAN M.A.



THE FOLLOWING CHAPTERS IN:

PUTZ M.V. (Editor)

*NEW FRONTIERS IN NANOCHEMISTRY: CONCEPTS, THEORIES, AND TRENDS,
VOLUME 3: SUSTAINABLE NANOCHEMISTRY*

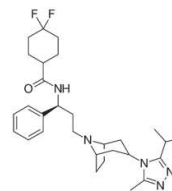
Apple Academic Press & CRC Press, Toronto-New Jersey, Canada-USA

pp. 504+index;

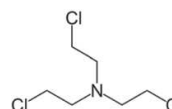
ISBN: 978-1-771887-79-3

♣URL: <http://www.appleacademicpress.com/new-frontiers-in-nanochemistry-concepts-theories-and-trends-volume-3-sustainable-nanochemistry-/9781771887793>

Ch. 1. Anti-HIV Agents
(pp. 1-24)
BUMBĂCILĂ B., **PUTZ M.V.**



Ch. 4. Cancer/Anti-Cancer Chemotherapy: Pharmacological Management
(pp. 57-84)
BUMBĂCILĂ B., DUDA-SEIMAN C., DUDA-SEIMAN D., **PUTZ M.V.**



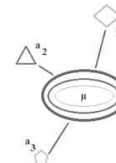
Ch. 9. Diabetes Mellitus/Anti-DM Pharmacological Management
(pp. 159-173)
BUMBĂCILĂ B., DUDA-SEIMAN C., DUDA-SEIMAN D., **PUTZ M.V.**

Software-aided molecular design and QSAR studies have a great potential in designing molecules as therapeutic agents in diabetes mellitus. However, since type 2 diabetes mellitus is a complex disease that includes several biological targets, multi-target QSAR studies are recommended in the future to achieve efficient antidiabetic therapies.

Ch. 10. Drug Development
(pp. 175-183)
DUDA-SEIMAN C., DUDA-SEIMAN D., **PUTZ M.V.**



Ch. 12. Free-Wilson Model
(pp. 205-216)
BUMBĂCILĂ B., **PUTZ M.V.**

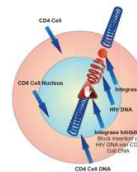


Ch. 13. HIV Infections/AIDS/Anti-HIV & AIDS: Pharmacological Management

(pp. 217-235)

BUMBĂCILĂ B., DUDA-SEIMAN C., DUDA-SEIMAN D., **PUTZ M.V.**

1. HIV gp120 is binding to the CD4 receptor.
2. HIV gp120 suffers a conformational change which increases its affinity for a co-receptor and exposes HIV gp41.
3. HIV gp120 binds to a co-receptor – either CXCR4 or CCR5.
4. HIV gp41 penetrates the HIV lipid membrane and the T cell membrane.
5. The viral core – the capsid is entering into the cell after the fusing of the viral envelope with the cell membrane.



Ch. 14. HIV-Integrase

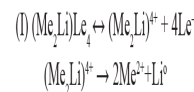
(pp. 237-246)

DUDA-SEIMAN C., DUDA-SEIMAN D., **PUTZ M.V.**

Ch. 15. Köln-Model as Toxicologically Procedure for (Some) Metals

(pp. 247-266)

CHICU S.A., TUDORAN M.A., **PUTZ M.V.**



Ch. 16. Köln-Model as Toxicologically Procedure for Oils and Derivatives

(pp. 267-281)

CHICU S.A., TUDORAN M.A., **PUTZ M.V.**

The Köln model based on Hydrocarbon Test System (HTS) is an *in vivo* biological procedure for toxicological investigation using the mutagenesis of the marine organism *Paramecium caudatum* (PC) as bioassay from the *Mezobiot* specific to plankton and the ordinary polytypic fishy phyla. The effectual experiments with crude oil, components, and derivatives show that the organism is suitable also for toxicity determination from this domain especially in case of accidents by offshore or increased drilling, transport by piping (pressure vessels) operational discharge, or by petroleum industrial accident. The HTS is simple, fast, reproducible, and needs the "3R" responses regarding the usage of the animal in laboratory experiments.

Ch. 17. Logistic Enzyme Kinetics

(pp. 283-287)

PUTZ M.V., PUTZ A.M., DUDA-SEIMAN C., DUDA-SEIMAN D.



Ch. 18. Minimal Steric Difference

(pp. 289-299)

BUMBĂCILĂ B., **PUTZ M.V.**

$$A_i = \alpha - \beta MSD_i$$

$$MSD_i = \sum_{j=1}^m d_j |w_j x_{ij} - v_j|$$

Ch. 19. Minimal Topological Difference

(pp. 301-306)

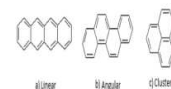
DUDA-SEIMAN C., DUDA-SEIMAN D., **PUTZ M.V.**



Ch. 21. Polycyclic Aromatic Hydrocarbons

(pp. 319-332)

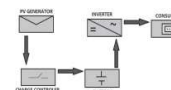
TUDORAN M.A., PUTZ A.M., PITULICE L., **PUTZ M.V.**



Ch. 23. Photovoltaic System

(pp. 347-358)

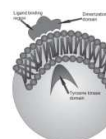
MIRICA M.C., TUDORAN M.A., **PUTZ M.V.**



Ch. 26. Receptor Binding

(pp. 381-386)

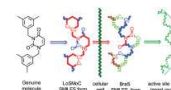
DUDA-SEIMAN C., DUDA-SEIMAN D., **PUTZ M.V.**



Ch. 27. Smiles

(pp. 387-402)

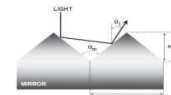
PUTZ M.V., DUDAS N.A.



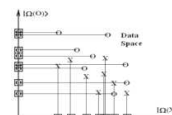
Ch. 28. Solar Cell

(pp. 403-418)

MIRICA M.C., TUDORAN M.A., **PUTZ M.V.**



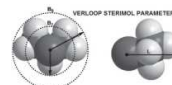
Ch. 29. Spectral-SAR
 (pp. 419-429)
PUTZ M.V., PUTZ A.M., DUDA-SEIMAN C., DUDA-SEIMAN D.



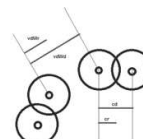
Ch. 31. Steric Taft Parameters
 (pp. 437-446)
 BUMBĂCILĂ B., **PUTZ M.V.**

$$\log \left(\frac{k_s}{k_{CH_3}} \right) = \delta E_s$$

Ch. 32. Sterimol Verloop Parameters
 (pp. 447-456)
 BUMBĂCILĂ B., **PUTZ M.V.**



Ch. 34. Van Der Waals Molecular Volume
 (pp. 471-481)
 BUMBĂCILĂ B., **PUTZ M.V.**



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

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

Tip documet	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>)	2	- Organizarea și participarea la workshop-ul internațional <i>Nano-Modeling of Strategic Materials for Knowledge Economy (Nano-Mod 2nd Edition 2019)</i> , West University of Timisoara-INCEMC Timisoara, 22-23 Aprilie 2019, Timisoara; - Prezentare la "Noaptea cercetatorilor europeni" 27.09.2019 – "Nokia Campus"- Timisoara.
	1	Prezentare la "Noaptea cercetatorilor europeni" 27.11.2020 – eveniment desfășurat on-line
	1	Prezentare la "Noaptea cercetatorilor europeni" 2021 – eveniment desfășurat on-line

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

Tip	Nr. Total	2019	2020	2021	2022
Tehnologii	10	6	2	1	1
Procedee	10	-	4	3	3
Produse informatice	-	-	-	-	-
Rețele	-	-	-	-	-
Formule	2	2	-	-	-
Metode	46	27	8	6	5
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	7	A00219/ 05.04.2019	Banica Radu Nicolae, Ursu Daniel Horatiu, Gurgu Radu, Patean Ioan	1. Liofilizator de înaltă temperatură pentru sinteza aerogelurilor
		A/00355/2019	Sfirloaga Paula, Mitrea Cristina, Vlazan Paulina, Poienar Maria, Baracu Angela	2. Dispozitiv de tip SUAS pe baza de materiale cu structura perovskitica - LaMnO ₃ :Ca sau Pd pentru detectia gazelor cu efect de sera
		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 senzitive de tip senzor
		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
		A/00299/02.06.2022	Nicolaescu Mircea, Lazau Carmen, Bandas Cornelia, Orha Corina, Vajda Melinda	1. Electrode flexibil pentru supercapacitori pe baza de aliaj amorf de fier decorat cu particule de Fe ₂ O ₃ ,
		A/00298/02.06.2022	Nicolaescu Mircea, Lazau, Carmen, Bandas Cornelia, Orha Corina	2. Dezvoltarea de senzori cu autoalimentare pe baza de heterojonctiuni oxidice transparente FTO-TiO ₂ -

				CuMnO ₂ pentru detectia radiatiilor ultraviolet
EPO	-	-	-	-
USPTO	-	-	-	-

4.4. Structura de personal:

Personal CD (Nr.)	2019	2020	2021	2022
Total personal	61	57	62	65
Total personal CD	55	57	62	64
cu studii superioare	52	56	61	64
cu doctorat	39	44	41	46
doctoranzi	6	6	14	12

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

Nr.	Nume și prenume	Grad	Funcția	Echivalent normă întreagă (ENI) 2019	ENI 2020	ENI 2021	ENI 2022	Anul angajării	Nr. Ore lucrate/ An* 2019	Nr. Ore lucrate/ An* 2020	Nr. Ore lucrate/ An* 2021	Nr. Ore lucrate/ An* 2022
1	Albulescu Daiana	ACS		-	-	0,92	0,73	2020	-	-	1752	1378
2	Ardelean Mariana	CJ	Sef comp./ Resp. juridic	0,68	-	-	-	2016	1236	-	-	-
3	Balcu Ionel	CSI	Director tehnic / Director general (din 25.11.2020)	0,80	0,82	0,91	0,73	1997	1460	1550	1731	1376
4	Bandas Cornelia Elena	CSII		0,82	0,82	0,92	0,73	2007	1499	1550	1752	1378
5	Banica Radu	CSII		0,70	0,84	0,92	0,73	2006	1280	1598	1752	1388
6	Blejdea Marian	Ec.	Resp. achizitii	0,88	-	-	-	2017	1603	-	-	-
7	Birdeanu (Vasile) Mihaela-Ionela	CSII		0,88	0,82	0,92	0,73	2006	1603	1558	1752	1378
8	Birsan Nicolae	ACS		0,88	0,82	0,58	0,73	2015	1603	1550	1100	1378
9	Boc Ioan Daniel	CSIII		0,88	0,82	0,92	0,73	1996	1603	1550	1752	1382
10	Bucur (Ioitescu) Alexandra-Ioana	CSIII		0,88	0,82	0,92	0,73	2007	1606	1550	1752	1388
11	Bucur Raul Alin	CSIII	Sef lab.	0,76	0,84	0,92	0,73	2004	1387	1598	1752	1378
12	Buzatu Doru Laurentiu	CSIII	Sef comp.	0,88	0,84	0,93	0,73	2006	1603	1584	1783	1380
13	Casut Cristian	ACS		-	-	0,92	0,73	2020	-	-	1752	1378
14	Cata Adina-Elena	CSIII		0,89	0,82	0,92	0,73	2006	1617	1550	1758	1382
15	Chirita Mihaila Ioan Marius	CSIII		0,88	0,82	0,92	0,73	2008	1603	1550	1752	1378

16	Ciucanu Ionel	CS I		-	-	-	0,73	2020	-	-	-	1378
17	Dabici (Grozescu) AnaMaria	CSIII		0,88	0,82	0,92	0,73	2007	1603	1550	1752	1378
18	Dobrescu Marius Ciprian	CS		0,88	0,82	0,92	0,73	2008	1603	1550	1752	1378
19	Draghiciu Simona	Ec.	Director economic (până în 04.2021)/ Resp. economic	0,90	-	-	-	1996	1630	-	-	-
20	Farkas (Badea) Iuliana	CS		0,88	0,82	0,92	0,73	2010	1603	1550	1752	1378
21	Fitigau Firuta	CSIII		-	0,16	0,92	0,45	2013	-	298	1752	846
22	Frigura Iliasa Flaviu	ACS	Sef comp.	0,91	0,83	0,95	0,74	2016	1646	1572	1808	1398
23	Gheorghe Damaris	CS		-	0,82	0,92	0,73	2020	-	1550	1752	1378
24	Gugoasa Livia Alexandra	CSIII		0,38	0,66	-	-	2012	684	1252	-	-
25	Gui Valeru	Ec.		0,51	-	-	-	2004	931	-	-	-
26	Gurgu Radu	tehn.		0,16	-	-	-	2005	293	-	-	-
27	Ianasi (Svera) Paula	CSIII		0,88	0,82	0,70	-	2014	1603	1550	1336	-
28	Ica Sabina Raluca	CS		-	-	0,92	0,73	2020	-	-	1752	1378
29	Ienascu Ioana Maria Carmen	CSIII		0,89	0,82	0,92	0,73	2008	1617	1550	1758	1382
30	Iorga Mirela Ioana	CSIII	Sef comp.	0,75	0,84	0,94	0,73	1996	1356	1584	1789	1380
31	Ivanovici Madalina Gabriela	ACS		-	-	0,92	0,73	2020	-	-	1752	1378
32	Lazau Carmen	CSII	Sef lab.	0,82	0,82	0,93	0,74	2003	1483	1553	1780	1397
33	Ladasiu -Ciolacu Flaviu	ACS		-	-	0,43	0,73	2020	-	-	830	1378
34	Linul Petrica	ing.		0,88	0,82	0,92	0,45	2014	1606	1550	1752	846
35	Macarie Amalia Corina	CSIII		0,73	0,82	0,90	0,73	2004	1318	1550	1725	1380
36	Mayer Felicia	Ec.	Resp. economic	0,86	-	-	-	1996	1555	-	-	-

37	Marghitas Mihai-Petru	tehn.		-	0,48	0,92	0,73	2020	-	915	1752	1378
38	Miclau Marinela	CSI	Sef dept.	0,79	0,85	0,93	0,73	2001	1438	1618	1782	1378
39	Mihai Ruxandra	CSIII		-	0,82	0,92	0,73	2019	-	1550	1752	1378
40	Mirica Marius Constantin	CSII	Sef dept.	0,84	0,82	0,92	0,73	1998	1523	1550	1752	1382
41	Mirica Nicolae	CSI	Director general (până în 25.11.2020)	0,89	0,82	-	0,61	1996	1613	1550	-	1151
42	Mocanu Liviu Lucian	CS		0,88	0,82	0,92	0,73	1996	1603	1558	1752	1378
43	Mogirzan Adela	CJ	Sef comp. Resp. juridic	0,86	-	-	-	2003	1555	-	-	-
44	Mosoarca Cristina	CSIII		0,88	0,82	0,92	0,73	2006	1606	1550	1752	1378
45	Negut Catalina	CSII		0,26	0,82	0,92	0,73	2017	464	1550	1752	1376
46	Nicolaescu Mircea Dan	ACS		-	-	0,92	0,73	2020	-	-	1752	1378
47	Novaconi Stefan	CSI	Sef lab.	0,65	0,82	0,92	0,73	1996	1187	1550	1752	1377
48	Orha Ileana-Corina	CSIII		0,81	0,82	0,92	0,73	2000	1470	1550	1752	1378
49	Pandurescu Carmen	CS		0,73	0,82	0,92	0,73	1996	1335	1550	1752	1378
50	Pascariu Cosmin	ACS		0,44	0,41	0,48	0,36	2016	807	774	926	677
51	Pătean Ioan	tehn.		-	-	-	0,05	2022	-	-	-	100
52	Poienar Maria	CSIII		0,88	0,82	0,92	0,73	2006	1603	1550	1752	1388
53	Popescu Mina Ionela	ACS		-	-	0,92	0,73		-	-	1752	1378
54	Putz Mihai Viorel	CSI	Sef lab.	0,88	0,84	0,95	0,73	2015	1603	1584	1810	1371
55	Racu Andrei	CS		0,88	0,82	0,92	0,32	2014	1606	1550	1752	605
56	Rosu Dan Cristian	CSIII		0,89	0,84	0,93	0,73	1996	1611	1584	1772	1382
57	Rus Florina Stefania	CSII		0,74	0,82	0,92	0,73	2014	1336	1550	1752	1378
58	Sarbu Mirela	CSIII		-	-	0,92	0,73	2021	-	-	1752	1378
59	Sebarchievici (Popa) Iuliana	CSIII		0,88	-	-	-	2006	1606	-	-	-

60	Serban Rodica Ioana	Ec.		0,29	-	-	-	2018	519	-	-	-
61	Sfirloaga Paula	CSI	Sef dept.	0,85	0,82	0,94	0,74	2003	1546	1550	1798	1404
62	Stancu Ionela	CSIII		-	0,16	0,92	0,73	2012	-	298	1752	1378
63	State Ramona	CSIII		-	0,82	0,92	0,73	2012	-	1550	1752	1378
64	Stefanut Mariana Nela	CSII		0,91	0,82	0,92	0,74	1996	1653	1560	1765	1399
65	Tanasie Cristian Dan	CSIII		0,88	0,66	-	-	2006	1603	1252	-	-
66	Taranu Bogdan Ovidiu	CSIII		0,80	0,82	0,93	0,74	2008	1448	1550	1768	1399
67	Taranu Ioan	CSI	Director stiintific	0,88	0,82	0,92	0,59	1996	1603	1550	1758	1115
68	Topciov Atena	tehn.		0,47	-	-	-	1996	849	-	-	-
69	Topciov Gheorghe	tehn.		0,44	0,33	-	-	2005	802	617	-	-
70	Tuchiu Bianca	ACS		-	-	0,22	0,73	2021	-	-	416	1378
71	Tudoran Marina Alexandra	ACS		0,88	0,82	0,93	0,73	2014	1603	1550	1770	1378
72	Urmosi Zoltan Gyula	CS		0,88	0,82	0,92	0,73	2006	1603	1550	1758	1378
73	Ursu Daniel Horatiu	CSIII		0,88	0,85	0,92	0,73	2008	1603	1618	1762	1378
74	Vajda Melinda	ACS		-	-	0,92	0,73	2020	-	-	1750	1378
75	Vaszilcsin Cristian George	CSIII		0,27	0,80	0,87	0,72	2006	1603	1518	1672	1368
76	Vlazan Paulina	IDTI		0,24	0,79	0,93	0,72	1998	1464	1492	1783	1364
77	Van Staden Jacobus Frederick	CSI		0,88	0,84	-	0,73	2007	486	1584	-	1374
78	Van Staden Raluca Ioana	CSI	Sef lab.	0,81	0,82	0,92	0,57	2007	430	1550	1752	1076
79	Zamfir Alina Diana	CSI		0,38	0,82	0,91	0,73	2006	696	1550	1748	1376

* 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	Liofilizator înaltă temperatură	Realizat în cadrul proiectului	-	PN 19 22 01 01	-	320
2	Telescop 3D de înaltă temperatură	18.02.2019	23.900	PN 19 22 01 01	23.900	400
3	Capcana de azot lichid	01.04.2019	5.355	PN 19 22 01 01	5.355	30
4	Masina de gaurit/frezat	04.04.2019	7.720	PN 19 22 01 01	7.720	40
5	Manometru digital	24.10.2019	3.010	PN 19 22 01 01	3.010	28
6	Scanner HP	24.04.2019	17.487	PN 19 22 01 02	17.487	360
7	Laptop Lenovo	25.10.2019	3.600	PN 19 22 01 02	3.600	80
8	Sistem desktop Dell	22.11.2019	4.200	PN 19 22 01 02	4.200	100
9	Tank computer for Hybrid controller	25.11.2019	5.612	PN 19 22 01 02	5.612	110
10	Moara cu bile	01.07.2019	25.422	PN 19 22 01 03	25.422	410
11	UV WinLab V6 Software upgrade	24.06.2019	4.427	PN 19 22 01 03	4.427	100
12	Microscop trinocular	08.10.2019	3.360	PN 19 22 01 03	3.360	80
13	Agitator cu încălzire	28.10.2019	4.522	PN 19 22 02 01	4.522	100
14	Agitator cu încălzire	30.08.2019	4.522	PN 19 22 03 01	4.522	100
15	Rigol DSA832-TG spectrum analyzer	20.02.2019	28.280	PN 19 22 04 01	28.280	400
16	UV Ozone Cleaner-L2002A2-EU	03.10.2019	14.842	PN 19 22 04 01	14.842	280
17	Sistem desktop PC Dell Vostro	04.11.2021	3791	PN 19 22 02 01	3791	160
18	Sistem Desktop PC ASUS D700SAES	03.05.2022	2800	PN 19 22 03 01	2800	320

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

	Nr.	Tip
Proiecte internaționale	2	
	1	Orizont 2020 WIDERA

	1	grant High performance computing
Proiecte naționale	22	
	4	PN-III-P2-2.1-PED2019
	1	PN-III-P1-1.1-TE2019
	1	PN-III-P2-2.1-PED2020
	1	PN-III-P1-1.1-TE2020
	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
	2	Proiect de mobilitati
	1	INO-SEN-Tehnologie INOVativa de realizare a SENzorilor pentru gaze de sera, Apel de proiecte nr. POC-A.1-A.1.2.1- C- 2022 Denumire apel proiecte: POC/1025/1/3/Stimularea cererii întreprinderilor pentru inovare prin proiecte CDI derulate de întreprinderi individual sau în parteneriat cu institute de CD și universități, în scopul inovării de procese și de produse în sectoarele economice care prezintă potențial de creștere Tip de proiecte: Întreprinderi inovatoare de tip start-up și spin-off

6. Rezultate transferate în vederea aplicării :

Tip rezultat	Instituția beneficiară (nume instituție)	Efecte socio-economice la utilizator
Materiale perovskitice sintetizate prin metode conventionale și neconventionale pentru realizare de senzori de gaz	ECONIRV SRL	-

7. Alte rezultate:

- Crearea la INCEMC a unui colectiv de cercetare în domeniul produsilor naturali cu activitate biologică respectiv de sinteza organică fină, prin implementarea strategiilor moderne de sinteza și extracții selective cu ajutorul cavitantilor;
- Valorificarea florei și faunei din Carpați și Marea Neagră;
- Diversificarea produselor farmaceutice și cosmetice indigene bazate pe produse naturale;
- 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.
- 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 Miclau, Guest Editor, Special Issue: Fabrication of Electrodes for Dye-Sensitized Solar Cells, Journal: *Crystals*;
- Premii Naționale:

Nr.crt	Titlu manifestare	Autori/Titlu invenție	Premiu obținut
1	European Exhibition of Creativity and Innovation,	Lazau Carmen, Poienar Maria, Vlazan Paulina, Orha Corina, Bandas Cornelia, Vajda Melinda,	Medalie Argint

	EUROINVENT, 2022	Nicolaescu Mircea <i>"Development of „n-p” heterojunctions based on n-type ZnO and p-typeCuMnO₂, integrated in sensitive modules"</i>	
2	European Exhibition of Creativity and Innovation, EUROINVENT, 2022	Mircea Nicolaescu, Viorel-Aurel Serban, Cornelia Bandas, Corina Orha, Carmen Lazău, Simona Căprărescu, <i>"Fabrication of a UV Photodetector Based on n-TiO₂/p-CuMnO₂ Heterostructures"</i>	Medalie Bronz
3	European Exhibition of Creativity and Innovation, EUROINVENT, 2022	Mircea Nicolaescu, Viorel-Aurel Serban, Cornelia Bandas, Corina Orha, Carmen Lazău, Simona Căprărescu, <i>"Fabrication of a UV Photodetector Based on n-TiO₂/p-CuMnO₂ Heterostructures"</i>	Special Prize from "Lucian Blaga" University of Sibiu, for recognition and appreciation of scientific creativity and originality

8. Aprecieri asupra derulării programului și propunerii:

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

În cadrul prezentului Program Nucleu – **Tehnologii nepoluante și inovative pentru sanatate, 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 **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 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 MCID în anul 2022 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.** Grafenronică 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 in 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

- Dimensionarea unui liofilizator de înaltă temperatură;
- Proiectarea și construirea unui liofilizator de înaltă temperatură;
- Particule de hidroxiapatită cu factor de formă ridicat - Spectre de raze X; Imagini de microscopie electronica de scanare; Spectre in infrarosu; Curbe termogravimetrice;
- Structuri tridimensionale poroase de hidroxiapatita - spectre de raze X; imagini de microscopie electronica de baleiaj;
- Sinteza nanostructurilor de argint si a spumelor flexibile impregnate cu nanoparticule de argint;
- Sinteza aerogelurilor pe baza de argint;
- Efectuarea masuratorilor de compresiune - rezistenta electrica pentru materiale hibride;
- Realizarea liofilizarii 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;
- Dezvoltarea metodei hidrotermale simple pentru sinteza rapidă a nanostructurilor oxidice cristaline bine definite.
- Analiza rezultatelor formării oxizilor de Fe Mn și Co cristalini și MnO₂, unde timpul și temperatura de autoclavare au avut o mare influență în procesul de obținere a structurii dorite.
- Studiul electrochimic efectuat pe suporturi de grafit modificate cu compoziții care conțin birnessit, având ca scop identificarea electrodului modificat cu cea mai mare capacitate electrică dublu strat, a relevat că acest electrod este cel modificat prin turnarea în picătură a MnO₂ și a carbonului conductor Vulcan dintr-o suspensie în etanol .
- S-au măsurat valorile capacității dublu strat, ale factorului de rugozitate și ale suprafeței electrochimic active obținute pentru electrodul modificat.
- Realizarea mai multor tipuri de structuri poroase, inclusiv aerogeluri pe bază de grafit și argint decorate cu particule de platină.
- Testarea electrochimică a electrozilor pentru a evidenția comportamentul acestora în reacțiile de degajare ale H₂ și O₂.
- Identificarea posibilelor aplicații în construcția de celule de electroliză și pile de combustie.
- Modificarea suprafeței compozitelor conductoare cu ajutorul unui catalizator de Pt (folosit uzual în componența pilelor de combustie), pentru a micșora suprapotențialele de degajare a H₂, respectiv O₂.
- Caracterizarea electrochimică a noilor electrozi prin tehnica voltametriei, prin înregistrarea de voltamograme ciclice și liniare.
- Depunerea matriceală a GO/TiO₂ pe ITO;
- AFM – realizat pe distanța dintre depunerea de GO și TiO₂;

- Rezistența electrică, tensiunea electrică, intensitatea curentului electric al materialelor depuse (matrici GO / TiO₂);
- Depunerea matriceală a GO/ZnO/GO pe ITO;
- Rezistența electrică, tensiunea electrică, intensitatea curentului electric ale materialelor depuse (matrici GO/ZnO/GO);
- Modelarea și observarea experimentală a supra-curentului electric "verde" (pe suport grafenic) cu ajutorul grafentronicii, prin configurații inovative de heterojonțiuni matriceale (Oxid de Grafen/GO, în combinație cu Oxid de Titan TiO₂, respectiv de Zinc/ZnO);
- Proiectarea joncțiunilor matriceale de tip grafentronic cu 3 oxizi-4 atomi (Graphene-oxide GO∩ZnO∩TiO₂) prin combinații inteligente cu efecte cuantice asupra îmbunătățirii transportului informațional cuantic folosind tranzistoarele cu porți grafenice obținute (GGT), înlocuind astfel tehnologia pe bază de siliciu (Silicon Gate Transistors) și a efectului aliat MOSFET (*metal-oxide-semiconductor field-effect transistors*) prin versiunea prezentată GFET (*graphene-based field effect transistor*);
- 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;
- 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 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;
- 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;
- Realizarea și caracterizarea unor microcircuite cuantice pe bază de grafen depus controlat, cuplate cuantic și funcționalizat în configurații matriceale (inovativ față de heterojoncțiunea transversală prezentă, cele actuale fiind tributare blocajului Coulombic și interacțiilor slabe van der Waals) cu controlul punctelor de contact, astfel: fie prin zone de multigrafenă matriceală, respectiv prin funcționalizare pe substrat de mono-grafenă – cu realizare de clustere cuantice capabile de stocare a energiei moleculare prin efecte locale de electrochimie cuantică (de spin), fie prin efecte de tunelare controlată în grafene cu defecte topologice și/sau structurale (așa-numitele grafene semiconductoare), respectiv prin fotoactivarea clusterelor cuantice de grafen depuse învecinat, de tip micro-circuit integrat cu porți logice, nano-deca semiconductori cuantici cuplați magnetic (de spin) și foto-activați cu precizie metrologică (prin combinarea efectelor Hall, Josephson și de tunelare) a funcțiilor de curent, potențial și randament cuantic asociate nanostructurilor investigate.
- Materiale – nanomateriale cu morfologii diferite de tipul WO₃ și Fe₂O₃ sub forma de pulberi, dar și crescute „in situ” pe placuta de wolfram și respectiv, fier;
- Oxizi pe baza de cupru (CuO/Cu₂O) cu diferite dimensiuni și morfologii ca și material transportor de goluri în celula solara perovskitica;
- Oxizi de fier (Fe₂O₃) și oxid de titan (TiO₂) cu diferite dimensiuni și morfologii ca și material transportor de electroni în celula solara perovskitica;
- Compuși nanometrici de CuInS₂/ZnS înglobați în polymethylmethacrylate (PMMA);
- Compuși Y₂O₃:Er/Yb înglobați în polymethylmethacrylate (PMMA);
- Ceramici piezoelectrice pe baza de (K_{0.5}Na_{0.5})NbO₃;
- Ceramici piezoelectrice cu structura perovskita de tipul SmBO₃, respectiv GdBO₃ (unde B= Al, Co, Cr, Fe, Mn);
- Obținerea, caracterizarea și optimizarea nanomaterialelor de tipul Li₄(M,Mn)O₅, unde M=V,Cr, folosite în stocarea energiei electrice.
- Obținere celule solare sensibilizate cu colorant (DSSC-uri) pe baza de oxizi de fier crescuți hidrotermal direct pe placuta metalica de fier, folosind coloranți și electroliti organici., după cum urmează:
 - celulele solare sensibilizate cu colorant (DSSC-uri) pe baza de Fe₂O₃ crescut crescut „in situ” hidrotermal direct pe placuta metalica de fier cu PVP în solutia hidrotermala;
 - celulele solare sensibilizate cu colorant (DSSC-uri) pe baza de Fe₃O₄ crescut crescut „in situ” hidrotermal direct pe placuta metalica de fier cu EC în solutia hidrotermala;
 - optimizarea parametrilor de sinteza a filmelor de oxid de fier în functie de eficiența DSSC-urilor;
 - optimizarea celulelor solare de tip n DSSC prin alegerea colorantului și electrolitului optim;
 - identificarea problemelor tehnologice ce limitează încă eficiența celulelor solare, urmând a fi rezolvate în continuarea etapei a treia.
- Obținere celule solare (sensibilizate cu colorant-DSSC și perovskitice) și generatoare piezoelectrice au fost obținute, după cum urmează:
 - Celulele solare sensibilizate cu colorant (DSSC-uri) pe baza de oxid de wolfram crescut „in situ” hidrotermal sau termic în atmosfera controlată oxidativă direct pe placuta metalica de wolfram;
 - S-a demonstrat efectul benefic al hidrogenului suplimentar asupra oxizilor de cupru, prin promovarea ancorării colorantului (chemisorbtia puternică a grupărilor de ancorare -COOH pe substratul semiconductor), ducând 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 Cu₂O/CuO apare ca fiind cea mai bună alegere în proiectarea fotocatozilor extrem de eficienți în DSSC de tip-tandem. Implementarea și testarea acestuia este însă condiționată de proiectarea și sinteza a noi coloranți organici ca sensibilizatori pentru DSSC de tip-p, caracterizați 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.
- Optimizarea metodei hidrotermale pentru obtinerea de cantitati necesare pentru realizarea electrodului pozitiv al bateriei pe baza de Mn prin utilizarea unei etape intermediare de agitare sub temperatura controlata, pentru a mari solubilitatea materialelor precursor;
 - Eficientizarea materialelor prin utilizarea unei temperaturi de sinteza hidrotermala de 250 °C si a timpului de reactie de 48 h pentru a asigura o mai buna cristalizare si astfel o mare stabilitate a materialelor in procesul de incarcare-descarcare a ionilor de litiu;
 - Materiale pentru baterii de tipul $\text{Li}_4\text{Mn}_2\text{O}_5$ - au fost determinati si optimizati parametrii hidrotermali care favorizeaza si stabilizeaza faza cristalina $\text{Li}_4\text{Mn}_2\text{O}_5$, voltamograma ciclica demonstrand capacitatea acestui material de a fi folosit in 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 determinati si optimizati parametrii hidrotermali care favorizeaza si stabilizeaza faza cristalina $\text{Li}_4\text{V}_{0.6}\text{Mn}_{1.4}\text{O}_5$, valoarea mare a potentialului de oxidare pune in evidenta efectul benefic al substitutiei V de catre Mn. Insa instabilitatea structurii cristaline reprezinta un dezavantaj pentru utilizarea acestui material ca si 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 determinati si optimizati parametrii hidrotermali care favorizeaza si stabilizeaza faza cristalina $\text{Li}_4\text{Cr}_{0.6}\text{Mn}_{1.4}\text{O}_5$, valoarea mare a potentialului de oxidare pune in evidenta efectul benefic al substitutiei Cr de catre Mn. Insa instabilitatea structurii cristaline reprezinta un dezavantaj pentru utilizarea acestui material ca si dispozitiv de stocare a energiei;
 - Obtinerea de dispozitive integrate de generare si stocare de energie electrica, obiectivul principal al proiectului, implica ca in etapa urmatoare, sa se realizeze proiectarea si constructia unei baterii termice, parte din dispozitivul integrat.
 - Proiectarea si construirea unei baterii de stocare a energiei termice. Designul utilizat este nou, pe baza de tevi independente de aluminiu umplute cu material PCM de diverse tipuri, asamblate in fascicule cu distanta constanta intre ele, care permite circulatia apei. Acest sistem permite utilizarea oricorui materiale de test. Mai mult, pot fi utilizate simultan pana la 5 tipuri de materiale PCM cu proprietati diferite, ceea ce permite incarcarea si descarcarea bateriei cu agenti termici de temperaturi diferite.
 - In vederea utilizarii ulterioare a deseurilor de inox, aluminiu, alama sau cupru, s-au realizat amestecuri de parafina cu fire metalice in vederea imbunatatirii conductivitatii termice a materialului compozit utilizat.
 - Bateria termica a fost supusa catorva teste de transfer termic prin conductie, primele date fiind incurajatoare.

OBIECTIVUL PN 19 22 02. PROTECȚIA MEDIULUI ȘI TEHNOLOGII CURATE

- Materiale perovskitice de LaMnO_3 dopate care sa prezinte proprietati selective;
- Sinteza materialelor de LaMnO_3 dopate (Ag sau Ti) prin metoda ultrasonica cu sonotroda imersata in mediu de reactie si metoda sol-gel;
- Caracterizarea fizico chimica a materialelor obtinute.
- 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.
- 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).
- Au fost obținute filme subțiri (material hibrid pe baza de montmorillonite funcționalizat cu materiale perovskitice obținute prin metoda solid-solid), cu ajutorul metodei spin-coating utilizând 1500 rpm, timp de 30 s, urmată de calcinare la $450 \text{ }^\circ\text{C}$ timp de 60 de minute cu rata de încălzire de $1 \text{ }^\circ\text{C}/\text{min}$. Pentru a pune în evidență uniformitatea stratului, acestea au fost caracterizate prin microscopie de forță atomică și microscopie confocală. Mai mult, pentru a studia proprietățile electrice ale filmelor obținute a fost determinat potențialul benzii plate (flat-banda potential) care a fost obținut cu ajutorul metodei Mott-Schottky.
- Din analiza rezultatelor obținute, potențialul de bandă plană (V_{fb}) pentru Hb_{ned} este de -0.74V și crește la -0.91V pentru Hb_2 . Pentru probele Hb_3 V_{fb} este de -0.44V , iar pentru Hb_6 V_{fb} este de -0.81V . Din analiza Mott-Schottky se poate observa faptul că toate probele au un caracter de semiconductor de tip-n. De asemenea, s-a determinat numărul de purtători de sarcină pentru toate cele 4 probe. Pentru proba Hb_{ned} - Nd este de $6.48 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ și crește la $7.46 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ pentru Hb_6 și $9.93 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ pentru Hb_2 . Se poate observa faptul că densitatea de electroni crește odată cu introducerea ionilor de Eu și Ag în interiorul materialului LaMnO_3 . O densitate de electroni și mai mare se observă atunci când se introduce ioni de Pd. Valoarea densității crește până la $2.29 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.
- Pentru realizarea proprietăților electrice s-a ajuns la concluzia, că filmele să fie depuse pe suport de sticlă, deoarece datorită stratului foarte subțire, depunerea unei masti de Ag poate conduce la o penetrare a argintului până la substratul de FTO și implicit la un scurt circuit. Astfel, depunerea filmelor a fost realizată cu ajutorul metodei spin-coating, utilizând 2000 rpm, timp de 30 s, urmată de calcinare la $450 \text{ }^\circ\text{C}$, timp de 60 de minute, cu rata de încălzire de $1 \text{ }^\circ\text{C}/\text{min}$. Mască de Ag a fost depusă cu ajutorul evaporării termice și este depusă pe o suprafață mică din film ca să poată realiza un contact cât mai bun între fil-mască de argint. Firele au fost lipite cu ajutorul pastei de indiu, utilizând ultrasunetele. În felul acesta a rezultat un contact omic, având o rezistență internă de aproximativ 0.5Ω .

OBIECTIVUL PN 19 22 03. SĂNĂTATE ȘI CALITATEA VIEȚII

- Obținerea extractelor de compuși naturali din matrici autohtone prin diverse metode: extracția clasică (decoct, macerare, extracție sub agitare, extracție sub presiune), în câmp ultrasonor, în câmp cu microunde; testarea unor solvenți de extracție: apă, alcoolii inferiori, acetonitril;
- Obținerea unor compuși noi biologic activi derivați ai acidului salicilic: anilide, esteri, hidrazide și hidrazone.
- 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).
- 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 complexi 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) - incluși în ciclodextrine naturale ($\alpha\text{-CD}$, $\beta\text{-CD}$, $\gamma\text{-CD}$) și modificate (hidroxipropil- β -ciclodextrina), prin metode de complexare triturare (frământare), co-precipitare, 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 $4000\text{--}400\text{ cm}^{-1}$ sau în modul ATR-FTIR pe domeniul $4000\text{--}650\text{ cm}^{-1}$ 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 modificari atestă formarea unor noi stări solide;
- Spectrele de reflectanță/absorbanță 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 compușilor 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 compușii ca atare.

- Finalizarea caracterizării complexilor în fază solidă ciclodextrine/compuși naturali și ciclodextrine/compuși sintetici. Caracterizarea fizico-chimică a complexilor de incluziune s-a realizat folosind tehnicile: spectrometrie FTIR și Raman, difracția de raze X RX, spectrofotometrie UV-VIS-NIR, microscopia electronică de baleiaj SEM și analiză termică (analiza termogravimetrică TG, analiza calorimetrică diferențială DSC). Tehnicile de caracterizare utilizate pentru pulberile obținute au confirmat formarea cu succes a complexilor de incluziune ai ciclodextrinelor (α -ciclodextrină, β -ciclodextrină, γ -ciclodextrină, 2-hidroxi-propil- β -ciclodextrină) cu extractele naturale obținute, salicină și derivații hidroxibenzamidici sintetizați.
- Realizarea cercetărilor experimentale privind evaluarea activităților antimicrobiene a compușilor bioactivi studiați și a complexilor de incluziune în ciclodextrine pe tulpini microbiene de referință (*Streptococcus mutans* ATCC 35668, *Streptococcus pyogenes* ATCC 19615, *Staphylococcus aureus* ATCC 25923, *Escherichia coli* ATCC 25922, *Pseudomonas aeruginosa* ATCC 27853, *Candida albicans* ATCC 10231) și/sau pe tulpini izolate clinic (*Staphylococcus aureus*, *Enterococcus faecalis*, *Streptococcus agalactiae*, *Bacillus cereus*, *Escherichia coli*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Candida parapsilosis*, *Candida albicans*).
- Rezultatele obținute privind activitatea antimicrobiană a extractelor de plante din familia Brassicaceae pe tulpini microbiene de referință și izolate clinic au demonstrat un efect antimicrobian asupra bacteriilor Gram-negative puțin mai mare decât pentru cele Gram-pozitive în cazul extractelor de varză albă și ridiche neagră. Majoritatea tulpinilor bacteriene au prezentat sensibilitate moderată la extractele de conopidă sau broccoli și au fost mai sensibile la extractele de varză albă și ridiche neagră pentru care au fost evidențiate și efectele bactericide. Rezultatele obținute pot sugera că unele formule de extracte alcoolice de varză și ridiche neagră pot fi utile în lupta antimicrobiană. Mai mult, se poate emite ipoteza posibilei utilizări a acestor extracte ca noi opțiuni terapeutice pentru bacteriile rezistente. Rezultate benefice ar putea fi obținute prin utilizarea acestor extracte ca tratament topic sub formă de unguente.
- Demonstrarea rolului benefic al complexării asupra eficienței derivaților de salicilanilide cloro-substituiți noi, pornind de la premisa că captarea compușilor antimicrobieni în ciclodextrine ar trebui să conducă la un control adecvat al eliberării medicamentului, astfel încât medicamentele să poată fi folosit mai eficient. Complexii obținuți cu derivați de salicilanilide cloro-substituiți au demonstrat activitate antibacteriană bună asupra unor tulpini bacteriene Gram-pozitive (*Streptococcus mutans* ATCC 35668, *Streptococcus pyogenes* ATCC 19615, *Staphylococcus aureus* ATCC 25923).

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

- Realizarea sintezelor de laborator în vederea obținerii ceramicelor piezoelectrice de tipul $(K,Na)NbO_3$ prin reacție în fază solidă;
- Obținerea și caracterizarea componentelor semiconductoare de tip n - TiO_2 și ZnO , precum și componenta de tip p - $CuMnO_2$ prin metode hidrotermale la temperaturi și presiuni joase pornind de la diferiți precursori solubili în apă.
- Studii experimentale de laborator concretizate prin: obținerea de loturi de nanomateriale cu morfologii diferite de dioxid de titan (TiO_2), loturi de nanomateriale cu morfologii diferite de oxid de zinc (ZnO), loturi de nanomateriale de tip crednerite $CuMnO_2$;
- Obținerea de ceramice piezoelectrice pe baza de $(K,Na)NbO_3$ dopate cu $xmol\%$ $SmBO_3$, respectiv $GdBO_3$ (unde $B = Al, Co, Cr, Fe, Mn$), unde $x = 0.25, 0.5, 0.75, 1, 2.5, 5$,
- Studiul difractogramelor de raze X; Imagistica prin microscopie electronică; Comportamentul dielectric al materialelor la diferite frecvențe; Determinarea marimilor piezoelectrice; Calcularea coeficientului Poisson.
- 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 duratei cu care este depus fotorezistorul, respectiv diluției fotorezistorului utilizat;
- Proiectarea și realizarea aparaturii de laborator ce permite formarea imaginii folosind iluminarea Kohler;
- Rezultatele obținute vor sta la baza realizării tehnologiilor inovative de laborator de producere a acestor dispozitive tip senzor;
- Astfel, se vor desfășura activități pentru stabilirea parametrilor de lucru, a aparaturii necesare, a modului de lucru, a bilanțului de materiale și a consumurilor specifice la nivel laborator în vederea elaborării tehnologiei de obținere a straturilor senzitive;

- Se va redacta setul de parametri caracterizati electric pentru raspunsul dispozitivelor senzitive si valorile asteptate fara substanta senzitiva;
- Metodologia ce urmeaza a fi dezvoltata ,va include descrierea aparaturii si a instrumentelor care trebuie utilizate pentru efectuarea masuratorilor, precum si a punctele de reglaj.
- Realizarea cu succes si optimizarea procedeului de fotolitografiere a unor electrozi interdigitali de Argint utilizind metoda fotorezistorului negativ;
- Obținerea unor straturi groase, conductoare electric de Argint pe substratul de cuarț monocristalin, utilizând evaporarea termica;
- Imaginea electrozilor interdigitali a fost obtinuta utilizind imaginea in negativ a obiectului dorit a fi fotolitografiat, respectiv metoda coroziei chimice de realizare a imaginii in pozitiv pe substratul dorit;
- Optimizarea timpului de expunere, a dilutiei fotorezistorului utilizat, dilutiei substantei utilizate la corodarea chimica, respectiv a timpului optim de corodare chimica;
- Optimizarea aparaturii de laborator ce permite formarea imaginii dorite prin iluminare Kohler;
- Obținerea electrozilor interdigitali de tipul linie de intarziere, respectiv testarea acestora prin analiza spectrala utilizind analizorul RIGOL DSA832.
- Proiectarea si realizarea instalatiei de testare a senzorilor.
- Camera de testare a senzorilor este compusa din mai multe subansamble:camera de amplasare senzor realizata din Teflon, capac etansare camera testare realizat din Teflon, cupola de sticla, care permite observarea senzorilor in timpul testarii acestora, zone de intrare si iesire gaze, pini de tip sonda placate cu aur, care permit realizarea contelor ohmice si achizitia de date generate de senzorul testat, mufa achizitie de date, care permite colectarea datelor fara a modifica conditiile de atmosfera controlata din incinta de testare, incalzit, care permite colectarea datelor senzorilor la diferite temperaturi, astfel incat sa se poata determina variatia sensibilitatii in functie de temperatura, si temperatura - senzorul prezinta cea mai buna sensibilitate.
- Instalatia de testare este compusa din urmatoarele subansamble: butelii de gaz, umidificatoare, robineti, controlere de masa, camera amestecare gaze, camera de testare senzori, masurare si achizitie date.
- Masuratorile electrice pentru testarea senzitivitatii senzorilor au fost realizate utilizand instrumentul model Keithley 2450 SourceMeter SMU.
- Masuratorile de tipul curent-tensiune (I-V) au fost efectuate pentru demonstrarea comportamentului heterojunctiunii n-TiO₂/p-CuMnO₂ si sensibilitatea la diferite concentratii de gaze.
- Măsurătorile au fost înregistrate în polarizare directă cu „-“ în zona „n” sticla FTO și „+” pe filmul semiconductor CuMnO₂ de tip „p”. Tensiunea aplicată a variat în intervale cuprinse între -2 V și 2 V cu pasul de 10 mV/s. Din masuratorile efectuate s-a putut observa o modificare a valorilor curentilor atat in partea pozitiva cat si in cea negativa a curbelor curent-tensiune acest fapt demonstrand sensibilitatea la interactiunea cu gazul targetat a heterostructurilor obtinute. De asemenea, se poate observa o crestere liniara a curentilor in functie de concentratia de CO₂. La o concentratie de 250 ppm CO₂ in gazul inert transportor de N₂ la un current de 2V s-a inregistrat un current de 3,27 μA, acesta crescand la 3,93 μA, 4,86 μA, 5,73 μA si 6,76 μA la 500, 750, 1000 si 1500 ppm CO₂. Sensibilitatea senzorului a fost determinata scanzand tensiunile proportional cu concentratia de CO₂ astfel ca la o diferenta de 250 ppm s-a obtinut o sensibilitate de 0,66, la 500 ppm 1,6 sensibilitate, iar la 1000ppm s-a obtinut o sensibilitate de 2,46.
- Obținerea si testarea senzorilor pe baza de unde acustice de suprafata, pe substrat piezoelectric, utilizind kitt-ul „Negative photorezistor I”.
- S-au obtinut straturi relativ groase conductoare electric de Argint pe substrat piezoelectric, utilizind evaporarea termica (Emitech K975X);
- A fost realizat cu succes si optimizat procedeul de fotolitografierea a unor electrozi interdigitali de Argint utilizind metoda fotorezistorului negativ; a fost optimizata aparatura de laborator ce permite formarea imaginii dorite prin iluminare Kohler, utilizind un microscopul LEVENHUK cuplat la o camera video LEVENHUK D740T 5.1M;
- Au fost obtinute si testate dispozitive SUAS cu diferite configuratii ale traductorilor de intrare si de iesire; au fost obtinute si testate dispozitive SUAS cu diferite aperturi numerice; au fost obtinute si testate dispozitive SUAS cu diferite distante intre traductorii de intrare si de iesire; au fost obtinute si testate dispozitive SUAS cu diferite suprafete sensibile dedicate sau reflectori de unda; au fost masurate si evaluate deplasarii frecventei de rezonanta, respectiv modificarii nivelului semnalului dispozitivelor SUAS, in absenta si prezenta contaminantului, utilizind analizorul spectral RIGOL DSA832.

În cadrul celor 6 proiecte finanțate în perioada 2019-2022, 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, în perioada 2019-2022 rezultatele obținute în urma cercetărilor efectuate în cadrul prezentului Program Nucleu – **Tehnologii nepoluante si inovative pentru sanatate, protectia mediului si eficienta energetica / 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 37 manifestări științifice (congrese internaționale, simpozioane, seminarii, conferințe) din domeniu, cu un număr de 95 de lucrări științifice;
- au fost publicate/sunt în curs de publicare în reviste cu referenți de specialitate un număr de 42 lucrări științifice în străinătate și 5 lucrări științifice în publicații relevante;
- au fost depuse 7 cereri de brevet la OSIM București;
- au fost publicate 30 capitole de carte la o editură din străinătate;
- a fost editată 1 carte (3 vol.) la o editură din străinătate;
- s-a organizat și s-a participat la workshop-ul internațional *Nano-Modeling of Strategic Materials for Knowledge Economy (Nano-Mod 2nd Edition 2019)*, West University of Timisoara-INCEMC Timisoara, 22-23 Aprilie 2019, Timisoara;
- s-au realizat prezentări la “Noaptea cercetatorilor europeni” – “Nokia Campus”- Timisoara (în fiecare an);
- s-au obținut 5 premii pentru cercetările realizate;
- 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 si inovative pentru sanatate, protectia mediului si eficienta energetica / TINSME** – au fost dezvoltate în concordanță cu direcțiile de cercetare prevăzute în strategia INCEMC.

Obiectivele specifice fiecărui proiect din cadrul Programului Nucleu au fost **îndeplinite** la termenele prevăzute, în limita bugetului alocat, având un nivel științific ridicat.

În cadrul celor 6 proiecte selectate și finanțate în perioada 2019-2022, 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 abordarea în viitorul Program Nucleu 2023-2026 a unor noi proiecte de cercetare în domeniul Programului Nucleu, astfel încât să poată fi realizate lucrări cu reale posibilități de dezvoltare a unor noi aplicații în cadrul unor proiecte naționale și internaționale, lucrări științifice, brevete de invenție, participări la târguri și expoziții, colaborări naționale și internaționale. Rezultatele obținute vor constitui baza aplicațiilor institutului la proiecte naționale și internaționale. Prin viitorul 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.

DIRECTOR GENERAL,
Dr.ing. Ionel BALCU



DIRECTOR DE PROGRAM,
Dr.ing. Ionel BALCU

CONTABIL ȘEF,
Ec. Ana Maria OPRÎȚA