

**Raport științific și tehnic (RST) in extenso  
ale etapei intermediare - Etapa de realizare nr. 5 / 12.11.2020**

privind

desfășurarea proiectului **CREȘTEREA CAPACITĂȚII ȘI PERFORMANȚEI INSTITUȚIONALE A INCDTIM CLUJ<sup>1</sup>, CRESC-ITIM**, din Programul 1 - Dezvoltarea sistemului național de cercetare-dezvoltare, Subprogramul 1.2 - Performanță instituțională - Proiecte de dezvoltare instituțională - Proiecte de finanțare a excelenței în CDI, PNCDI III

Contractul nr. 32PFE/19.10.2018; Act adițional nr. 10/12.08.2020  
Cod proiect<sup>2</sup>: ID 388

Etapă de realizare nr.5/2020;

Perioadă de realizare a etapei: de la 01.07 la 12.11.2020;

Elaborat de contractor: INSTITUTUL NAȚIONAL DE CERCETARE-DEZVOLTARE PENTRU  
TEHNOLOGII IZOTOPICE ȘI MOLECULARE, CLUJ-NAPOCA  
Cod fiscal contractor: 13221445

Reprezentant autorizat:

Funcția: DIRECTOR GENERAL/RECTOR  
Prenume și Nume: Romulus Valeriu Flaviu TURCU  
Semnătura și ștampila: \_\_\_\_\_

Director economic:

Prenume și Nume: Diana NICOARĂ  
Semnătura: \_\_\_\_\_

Director proiect:

Prenume și Nume: Claudiu FILIP  
Semnătura: \_\_\_\_\_  
Telefon: 0736 345902  
Email: claudiu.filip@itim-cj.ro

Declarăm, pe proprie răspundere, că datele furnizate prin prezentul Raport de activitate sunt reale și că toate cheltuielile s-au efectuat, în mod exclusiv, pentru realizarea obiectivelor prezentului proiect și în vederea obținerii rezultatelor asumate, în conformitate cu prevederile contractului de finanțare nr. \_\_\_\_\_/\_\_\_\_\_ încheiat între Ministerul Cercetării și Inovării (MCI) și \_\_\_\_\_ și cu respectarea principiilor legalității, economicității, eficienței și eficacității resurselor.

*Prezentul raport se prezintă la termenul de predare al etapei în format letric în 2 exemplare. Prezentul raport, lucrarea in extenso, împreună și cu alte documente suport menite să certifice realizarea activităților și obținerea rezultatelor proiectului aferente etapei de realizare pentru care au fost întocmite se vor prezenta în format electronic ca și documente scanate (Raport ST, Raport ST in extenso, Raport ST- alte documente) și asumate prin semnătură de către contractor. Autoritatea contractantă poate solicita documente justificative suplimentare la solicitarea evaluatorilor și nu numai dacă consideră necesar.*

<sup>1</sup> Informații privind toate rezultatele obținute până în prezent de la demararea proiectului se pot obține de pe pagina web, <https://www.itim-cj.ro/pncdi/cresc-itim/>

<sup>2</sup> ID-ul proiectului este cel din platforma online folosită pentru depunerea de proiect în cadrul competiției de proiecte.

## 1. Obiectivul(e) proiectului și contribuția acestuia la obiectivele programului/subprogramului:

### *Obiectiv general (OG):*

Utilizarea cu maximă eficiență a fondurilor de dezvoltare instituțională pentru creșterea valorii indicatorilor de performanță definiți prin program, la care INCDTIM este deficitar, sau a suferit regrese în perioada 2014-2017.

### *Obiective specifice:*

OS1 – Creșterea cu cel puțin 10% anual a numărului de articole în reviste cotate ISI / cercetător atestat;

OS2 – Creșterea cu cel puțin 5% anual a ponderii articolelor în reviste situate în primul sfert din ierarhia *Web of Science* (Q1) relativ la numărul total de articole ISI publicate;

OS3 – Solicitarea a cel puțin două brevete internaționale (EPO/USPTO) până la finalizarea proiectului;

OS4 – Creșterea cu cel puțin 20% până la finalul proiectului a ponderii fondurilor atrase din mediul privat și din proiecte externe în totalul bugetului;

OS5 – Crearea de mecanisme instituționale viabile pentru stimularea atragerii de fonduri din proiecte europene H2020 sau echivalente, pentru transfer tehnologic și brevetare internațională;

OS6 – Creșterea eficienței în activitatea CDI prin utilizarea optima a fondurilor alocate prin proiect pentru investiții în infrastructura de cercetare

OS7 – Creșterea vizibilității prin organizarea de evenimente de comunicare a rezultatelor CD remarcabile, de promovare a științei în societate și de stabilire de noi contacte cu mediul de afaceri

### ***Concordanța cu obiectivele subprogramului 1.2, Performanță instituțională, din cadrul PN3***

OG și OS 6 contribuie la realizarea obiectivelor (a) și (b) ale subprogramului, *susținerea planurilor de dezvoltare instituțională în vederea creșterii performanțelor în domeniul de activitate, respectiv susținerea competențelor naționale din instituții de cercetare în domenii economice de interes pentru România*; OS1, OS2, OS3 și parțial OS7 contribuie la realizarea obiectivului (c4) al subprogramului, *creșterea gradului de implicare și vizibilitate pe plan internațional*; OS4 și parțial OS5 contribuie la realizarea obiectivelor (c3) și (c2) ale subprogramului, *inițierea și dezvoltarea de colaborări viabile cu parteneri din mediul economic, respectiv acordarea de asistență tehnică și de servicii*; OS7 contribuie la realizarea obiectivului (c1) al subprogramului, *valorificarea și difuzarea cunoștințelor și rezultatelor de cercetare*;

## 2. Rezultate preconizate pentru atingerea obiectivului:

- ✓ Publicații în reviste cu factor de impact mare susținute prin program – minim 40 (peste 25 în Q1)
- ✓ Mobilități / stagii de lucru – 43 om x lună
- ✓ Propuneri de proiecte CDI europene de tip H 2020 și/sau similare – minim 2
- ✓ Contribuția la stimularea / formarea cercetătorilor tineri – cel puțin 75% din mobilități/stagii sunt adresate cercetătorilor de până la 40 ani, la care se adaugă cursuri de specializare pentru tineri
- ✓ Mecanisme de stimulare a ideilor noi – accesul la finanțarea mobilităților/stagiilor se face în sistem competitiv, pe baza unui plan de cercetare bine fundamentat
- ✓ Susținerea creării de noi locuri de muncă – 1 finanțat direct și cel puțin 5, indirect, prin stimularea noilor angajați pe diferite proiecte CDI
- ✓ Dezvoltarea infrastructurii de cercetare – investiții în infrastructură nouă (30% din buget), investiții în reparații/revizii a celei existente (15%) din buget
- ✓ Direcții de cercetare noi dezvoltate în domenii emergente sau de nișă – 2
- ✓ Direcții de cercetare susținute, care în concordanță cu priorități ale UE și naționale – 5
- ✓ Susținerea participării la proiecte colaborative internaționale de mare anvergură – 2, ATLAS@LHC CERN și DarkSide 20k

- ✓ Sprijin pentru inovare organizațională – înființarea unui compartiment nou, dedicat accesării fondurilor CDI europene; alinierea la regulile de bune practici internaționale în domeniul transferului tehnologic
- ✓ Sprijinirea activității de brevetare internațională – cel puțin o solicitare de brevet internațional până la finalizarea proiectului
- ✓ Creșterea cu cel puțin 20% a ponderii contribuției private la total buget
- ✓ Creșterea vizibilității prin organizarea de evenimente de comunicare a rezultatelor remarcabile, de promovare a științei în societate și de stabilire de noi contacte cu mediul de afaceri – cel puțin 5

### 3. Obiectivul(ele) etapei:

Activitățile desfășurate în perioada 01.07 – 12.11.2020 în cadrul Etapei V a proiectului au contribuit la îndeplinirea obiectivului general al acestuia, și în particular la îndeplinirea obiectivelor specifice OS1, OS2, OS5 și OS6.

### 4. Rezultate obținute pentru atingerea obiectivului(elor) etapei:

Activitățile efectuate în etapa curentă au contribuit la următoarele categorii de rezultate din cele propuse:

- ✓ Publicații în reviste cu factor de impact mare susținute prin program – 13 (10 în Q1)
- ✓ Mobilități / stagii de lucru ~ 5.93 om x lună
- ✓ Stimularea / formarea cercetătorilor tineri – din totalul timpului alocat acțiunilor de mobilitate ~ 3 om x lună s-a derulat în cadrul unor stagii de cercetare / formare profesională dedicate cercetătorilor tineri, de până la 40 ani
- ✓ Dezvoltarea infrastructurii de cercetare – investiții în reparații/revizii la infrastructura de cercetare existentă în reparații/revizii, inclusiv piesele de schimb aferente) ~ 124,792.94 lei
- ✓ Direcții de cercetare susținute, în concordanță cu priorități ale UE și naționale – 3
- ✓ Susținerea participării la proiecte colaborative internaționale de mare anvergură – anulate, din cauza restricțiilor legate de starea pandemică

### 5. Rezumatul etapei de realizare: (nu are un format standard, max. 10 pagini și trebuie dezvoltat pe puncte)

#### 5.1. Gradul de realizare ale obiectivelor

Rezultatele obținute în etapa curentă au contribuit la realizarea obiectivelor specifice OS1, OS2, OS5 și OS6. Valorile indicatorilor de rezultat sunt în concordanță cu creșterile anuale estimate. Acțiunile de mobilitate efectuate, contribuie la creșterea vizibilității internaționale conducând la inițierea de proiecte collaborative în viitor. Reparațiile efectuate și piesele de schimb achiziționate pentru un total de 4 echipamente de cercetare contribuie la îndeplinirea planului asumat privind investițiile în infrastructura de cercetare.

#### 5.2. Descrierea activităților efectuate față de Planul de realizare propus

Corespunzător Planului de realizare, în această etapă am efectuat următoarele activități:

*Activitatea II.1 Stagii de lucru la universități / centre de cercetare de prestigiu în scopul susținerii / dezvoltării noilor tematici de cercetare definite în Planul de Dezvoltare Instituțională; mobilități de scurtă durată în scopul integrării în Aria de Cercetare Europeană și a diseminării rezultatelor CDI*

În cadrul acestei activități au fost planificate acțiuni de mobilități de toate tipurile susținute prin proiect. Din motive obiective, legate de restricțiile de circulație impuse de pandemia de COVID 19, am reușit să efectuăm doar 3 acțiuni de mobilitate. Rapoarte mai ample asupra scopului și rezultatelor fiecărei acțiuni de mobilitate sunt anexate.

*Stagii de cercetare la*

1. Tipul acțiunii: VS (Visiting Scientist)

Institut für Wasserchemie - Technische Universität München, Germania în perioada: 17.09. – 02.10.2020, participant Dr. DINA NICOLETA ELENA, scopul deplasării: consolidarea

colaborării cu grupuri de cercetare pe tematica “Detecția și maparea comunicării celulare de tip quorum sensing în biofilme prin SERS”. Colaborarea s-a realizat pe două direcții:

- (i) caracterizarea filmelor subțiri de Au depuse prin tehnica de sputtering prin microscopie și prin evaluarea randamentului acestora în condiții experimentale de efect SERS;
- (ii) detecția piocianinei în biofilm de *P. aeruginosa* cu ajutorul substratelor metalice de Au depuse și caracterizate anterior utilizând tehnica ultrasenzitivă SERS.

Rezultate obținute: au fost filmele de Au au fost inițial investigate și caracterizate în perioada vizitei de lucru prin microscopie optică în termeni de transparentă și prin măsurători Raman/SERS în termeni de eficiență (factor de amplificare obținut în funcție de grosimea nanometrică a substratului). Intensitatea relativă a benzii marker SERS 749 cm<sup>-1</sup>, prezentă în semnătura spectrală a bacteriilor a fost corelată cu parametrii utilizați în procesul de depunere pentru a continua experimentele doar cu substratul optim pentru efectul SERS pentru alte specii bacteriene (inițial ca specie model s-a utilizat *E. coli*).

## 2. Tipul acțiunii: Formare profesională (FP)

Stagiul de formare profesională efectuat de Dr. SZOKE-NAGY Tiberiu a avut loc în perioada 25 Septembrie – 1 Noiembrie 2020 în Laboratorul de Ecologie Microbiană și Evolutivă din cadrul Departamentului de Ecologie Acvatică Microbiană, Institutul de Hidrobiologie, Centrul de Biologie al CAS din České Budějovice, Republica Cehă. Obiectivul stagiului a fost de a dobândi noi cunoștințe referitoare la tehnicile avansate de bioinformatică, asamblarea genomurilor și metagenomurilor recuperate din mediu acvatic. În cadrul stagiului au fost efectuate analize de secvențe, obținându-se rezultate cu privire la asamblarea *de novo* a genomului la *E. coli*, identificarea principalelor grupe taxonomice și abundența acestora din metagenomul unui lac precum și identificarea principalelor proteine și enzime din același metagenom. Printre perspective se numără stabilirea principalelor căi metabolice prezente în proba analizată și reconstrucția fluxului de nutrienți dintre principalele grupe taxonomice.

## 3. Tipul acțiunii: VS (Visiting Scientist)

Université du Littoral, Côte d’Opale (ULCO) , Dunkerque, Franta, 05.10-09.11.2020, participant Dr. STREZA MIHAELA. Vizita de lucru a avut ca scop consolidarea cooperării cu partenerul străin pe o tematică strategică a INCDTIM – și anume producerea și caracterizarea materialelor cu aplicații în domeniul stocării/conversiei de energie (materiale mezoporoase utilizate pentru stocarea H<sub>2</sub>, respectiv filme subțiri termoelectrice). Aceste materiale pot fi caracterizate dpdv termic prin tehnici specifice existente în cadrul UDSMM. (calorimetrie PPE în domeniul criogenic, radiometrie fototermică).

În cadrul acestei deplasări s-au continuat măsurătorile de caracterizare termică ale unor MOF-uri sintetizate în cadrul INCDTIM Cluj (măsurători demarate la temperatură ambiantă în cadrul primei vizite de lucru prin tehnica de radiometrie fototermică). În acest stagiul de lucru s-a utilizat calorimetria fototermică în domeniul criogenic pentru determinarea efuzivității termice a materialelor poroase investigate, deoarece aceste materiale sunt interesante din punct de vedere al adsorbției de hidrogen în domeniul temperaturilor joase (-175K).

### ***Activitatea II.2: Susținerea activității de brevetare***

A fost sprijinită o solicitare pentru un brevet național:

1. Cerere brevet a 2020 00323/06.06.2020 Procedeu de fabricare a emulsiei cosmetice cu extracte naturale cu factor de protecție solară (Loredana Soran, Ildiko Lung, Ocsana Opriș, Adina Stegărescu, Răzvan Podea)

Procedeu de fabricare a emulsiei cosmetice naturale cu factor de protecție solară, caracterizat prin aceea că peste amestecul de grăsimi încălzit pe baia de aburi la 70°C se adaugă în fir subțire faza apoasă obținută prin dizolvarea trietanolaminei, conservantului, EDTA și propilenglicolului în apa aflată la 80°C, amestecul menținându-se la cald, pe baia de apă, timp de 15 min, după care se răcește lent la temperatura camerei până la temperatura de 40°C, când se adaugă compoziția de parfumare și extractul natural hidroalcoolic (cătăină albă și/sau porumbele și/sau măr) în proporție

de 10% în raport cu masa emulsiei cosmetice și se amestecă până la răcirea completă și obținerea unei emulsii omogene.

Taxă menținere BI 131080 – Aplicator de microunde cu arie de detectori integrată pentru măsurarea temperaturii (Vasile Surducan, Emanoil Surducan, Nicolae Dădârlat)

Taxă menținere BI 130089 – Bloc de stabilizare și control destinat alimentării curentului de filament al magnetroanelor (Vasile Surducan, Emanoil Surducan, Angela Limare)

Taxă menținere BI 131442 — Procedeu de obținere a unui nou material nanocompozit cu aplicare în detecție electrochimică a ionilor de Pb<sup>2+</sup> (Lidia Măgerușan, Crina Socaci, Maria Coroș, Stela Pruneanu, Florina Pogăcean)

Taxă menținere BI 129983 — Metodă de atașare covalentă a monozaharidelor pe suprafețe cu grupări hidroxil (Alexandrina Nan, Rodica Turcu, Jürgen Liebscher)

### ***Activitatea II.3: Servicii de publicare în regim open acces***

A fost finanțată taxa de publicare pentru următorul articol:

B. Belean, R. Gutt, C. Costea, O. Bălăcescu, Microarray Image Analysis: From Image Processing Methods to Gene Expression Levels Estimation, *IEEE Access*, 2169-3536, Vol. 8 pp. 159196 – 159205, DOI: 10.1109/ACCESS.2020.3019844, IF 3.75, Q1.

### ***Activitatea II.4: Organizarea evenimente științifice sau de popularizare a științei***

A fost inițiată pregătirea un eveniment de diseminare a realizărilor CDI ale institutului către comunitatea științifică / profesională în cadrul aniversării a 70 de ani de la înființarea institutului. Ca urmare a creșterii foarte mari a numărului de infectări cu noul coronavirus, evenimentul care era planificat să se desfășoare la sfârșitul lunii octombrie, a fost anulat.

### ***Activitatea II.5: Achiziție stocuri – piese de schimb, materiale, consumabile***

Au fost achiziționate piese de schimb pentru reparații / mentenanță la următoarele echipamente de cercetare complexe:

1. Reparație și mentenanță pentru instalația de climatizare/încălzire a centrului de cercetare CETATEA; au fost înlocuite plăcile de automatizare și comunicație a circuitului de condiționare termică pentru circuitului de aer.
2. Electrode de referință Hg/HgO potenciostat-galvanostat AutoLab (piesă de schimb)
3. Lămpi UVA pentru fotoreactorul Luzchem (piese de schimb)

Au fost de asemenea achiziționate următoarele categorii de materiale/consumabile: piese de schimb, componente electronice, He lichid, gaze (Ar, N<sub>2</sub>), reactivi, solvenți, ustensile și consumabile de laborator.

### ***Activitatea II.6: Susținerea accesului la surse de informare științifică specifice activității INCDTIM***

A fost finanțată contribuția la literatura științifică prin programul Anelis Plus, necesare bunei desfășurări a multor proiecte de cercetare din institut.

### ***Activitatea II.7: Întreținere echipamente: revizii / mentenanță / service***

Au fost asigurate servicii de reparație / revizie la următoarele echipamente de cercetare complexe:

1. Spectrometrul de masă pentru rapoarte izotopice Delta V Advantage, THERMO ELECTRON CORPORATION, Germania: serviciul de mentenanță. Operațiuni efectuate: (i) s-a schimbat umplutura reactorului de piroliză; (ii) s-a efectuat testul de scăpări gaze; (iii) s-a condiționat coloana la 150°C; (iv) a fost dezvoltată metoda de determinare a oxigenului și hidrogenului din etanol; (v) s-au efectuat injecții de probă.
2. Spectrometrul de masă cu plasmă cuplată inductiv Elan DRC-e, PerkinElmer, SUA: serviciul de mentenanță. Operațiuni efectuate: (i) s-a efectuat întreținerea extinsă a echipamentului, s-au curățat, verificat, aliniat pompa peristaltică, nebulizatorul, injectorul, torța, conurile, filtrele de aer, ventilatoarele, răcitorul, sistemul ionic; (ii) s-a aliniat și optimizat sistemul ionic și parametrii de lucru ai acestuia; (iii) s-a efectuat intercalibrarea detectorului; (iv) s-a verificat final echipamentul, folosind soluția etalon de verificare recomandată de producător, rezultatele fiind bune.

3. Microscop UHV, AFM, STM, STS, produs RHK Technologies. S-a înlocuit de către reprezentantul producătorului blocul de electronică defect. Microscopul AFM,STM, STS cu rezoluție atomică a suprafețelor a devenit operațional, fiind folosit la studiul suprafețelor straturilor subțiri depuse prin pulsuri de radiație laser (PLD).
4. Spectrometru de fotoelectroni (XPS). A fost reparat modulul care conține sursa de radiație X monocromatizată. Spectrometrul a devenit astfel operațional fiind folosit în modul de înaltă rezoluție pentru studiul materialelor nanostructurate și al straturilor subțiri depuse în pulsuri de radiație laser (PLD)

### 5.3.Rezultate obținute vs rezultate planificate

Denumire indicator	Descriere	Val. planificată	Val. realizată	Surs e
Articole în reviste cotate ISI	<p>D Enescu, A Dehelean, C Gonçalves, MA Cerqueira, DA Magdas, P. Fucinos, L. M. Pastrana, <i>Food Packag. Shelf Life</i> <b>26</b>, (2020) 100579, (IF=4.244, Q1)</p> <p>DA Magdas, F Guyon, R Puscas, A Vigouroux, L Gaillard, A Dehelean, I. Feher, G. Cristea, <i>Food Chem.</i> <b>334</b> (2021) 127599 (IF=6.306, Q1)</p> <p>V.Surducan, E.Surducan, R.Gutt, <i>Energy</i>, <b>211</b>, (2020), 118645, (IF=6.08, Q1)</p> <p>V. Rednic, R. Gutt, E. Bruj and A. Bot, <i>Applied Thermal Engineering</i>, first revision (IF=4.725, Q1)</p> <p>R. Gutt, <i>Computers and Mathematics with Applications</i>, <b>79</b>, nr. 10, 2805-2818, (2020), (IF=3.37, Q1)</p> <p>T. Dippong, E. A. Levei, O. Cadar, I. G. Deac, M.D. Lazar, G. Borodi, I. Petean, <i>J Alloy Compd</i>, <b>849</b> (2020) 156695 (IF=4.65 Q1)</p> <p>M. Dan, M. Mihet, G. Borodi, M. D. Lazar, <i>Catal Today</i>, (2020) in-press (IF=5.82, Q1) <a href="https://doi.org/10.1016/j.cattod.2020.09.014">https://doi.org/10.1016/j.cattod.2020.09.014</a></p> <p>O. Grad, M. Mihet, M. Coros, M. Dan, M. D. Lazar, G. Blanita, <i>Catal Today</i>, (2020) in-press, (IF=5.82, Q1) <a href="https://doi.org/10.1016/j.cattod.2020.08.009">https://doi.org/10.1016/j.cattod.2020.08.009</a></p> <p>O. Grad, M.Mihet, G. Blanita, M.D. Lazar, Methanation of CO2 using MIL-53 based catalysts: Ni/MIL-53-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> versus Ni/MIL-53; trimis la <i>Int. J. Hydr. Energy</i> (IF=4.9; Q1)</p> <p>B. Belean, R. Gutt, C. Costea, O. Bălăcescu, <i>IEEE Access</i>, 2169-3536, Vol. 8 pp. 159196 – 159205, DOI: 10.1109/ACCESS.2020.3019844, (IF 3.75, Q1)</p> <p>S. Porav et al., Conformational flexibility of the cyanobacterial phycobilisome – manuscris în curs de elaborare</p> <p>S. Porav et al., The sub-nanometric structure of the phycobilisome from <i>A. platensis</i> – manuscris în curs de elaborare</p> <p>M. Streza et. Al., Thermal effusivity and heat capacity investigations of metal-organic frameworks by photopyroelectric technique and differential scanning calorimetry at cryogenic temperatures – manuscris în curs de elaborare</p>	10	13	

Mobilități susținute prin program (om x lună)	Au fost susținute acțiuni de mobilitate pentru 3 cercetători, cu durate cuprinse între 15 zile și 2 luni	10	3	
Solicitări de brevete naționale	Cerere brevet a 2020 00323/06.06.2020 Procedeu de fabricare a emulsiei cosmetice cu extracte naturale cu factor de protecție solară (Loredana Soran, Ildiko Lung, Ocsana Opriș, Adina Stegărescu, Răzvan Podea)	1	1	
Articole în reviste cotate ISI, publicate în regim <i>open access</i>	B. Belean, R. Gutt, C. Costea, O. Bălăcescu, Microarray Image Analysis: From Image Processing Methods to Gene Expression Levels Estimation, <i>IEEE Access</i> , 2169-3536, Vol. 8 pp. 159196 – 159205, DOI: 10.1109/ACCESS.2020.3019844 (IF 3.75, Q1)	1	1**	
Echipamente reparate (nr.)	Spectrometru de Masă pentru Rapoarte Izotopice Delta V Advantage Spectrometru de masă cu plasmă cuplată inductiv, ICP-MS, ELAN DRC-e Microscop UHV, AFM, STM, STS, produs RHK Technologies Spectrometru XPS produs SPECS - sursa de radiație monocromatizată	-***	4	
Materiale achiziționate (valoare)	Piese de schimb, componente electronice, He lichid, gaze (Ar, N2), reactivi, consumabile de laborator	-	~127,302 .07	

\* sunt specificate doar articolele acceptate și publicate până la data raportării – o analiză realistă asupra acestui indicator este posibilă doar după o perioadă mai mare de timp

\*\* taxa va fi achitată în etapa următoare

\*\* unde nu este specificat, nu a fost preconizată o valoare explicită în cererea de finanțare

#### 6. Se vor descrie și justifica eventualele discrepanțe în implementare proiectului față de etapa precedentă de realizare și acțiunile corective întreprinse.

Nu au fost constatate discrepanțe în implementarea prezentei etape a proiectului față de etapa precedentă, astfel încât nu au fost necesare acțiuni corective.

#### 7. Se vor prezenta achizițiile de bunuri sau servicii din cadrul proiectului

Achiziții previzionate în cadrul proiectului		Achiziții efectuate în cadrul proiectului		Procedura de selectare	Nr. de inventar (pentru bunurile achiziționate)/nr. FF	Denumirea unității prestatoare de servicii/nr. ctr.	Costuri (lei)	Obs.
bunuri	servicii	bunuri	servicii					
							<b>TOTAL (lei)</b>	

#### 8. Concluzii cu privire la prezenta etapă de realizare a proiectului;

Ca și în cazul etapei anterioare, ținând cont de constrângerile legate de situația pandemică, etapa curentă s-a desfășurat în linii mari conform prevederilor contractului de finanțare, cu perturbări doar ale acțiunilor legate de mobilitatea cercetătorilor și de organizarea de evenimente. Activitățile efectuate în aceste condiții au contribuit la susținerea planului de dezvoltare instituțională în vederea creșterii performanțelor în domeniul propriu de activitate, la creșterea gradului de implicare și vizibilitate pe plan internațional, precum și la valorificarea și difuzarea cunoștințelor și rezultatelor de cercetare.

## **9. Audit<sup>3</sup>**

*Pentru finanțarea de la bugetul de stat, se va transmite autorității contractante Certificatul de audit însoțit de raportul de audit financiar independent pentru cheltuielile efectuate în etapele aferente respectivului an. Documentele vor trebui conformate cu originalul, în cazul documentelor în copie.*

*Predarea acestor documente nu se aplică în cazul etapelor de realizare intermediare ale respectivului an.*

---

<sup>3</sup> În cazul etapelor de realizare anuale se va anexa certificatul și raportul de audit financiar aferent etapelor de realizare din anul respectiv la termenul comunicat de autoritatea contractantă pentru fiecare an.

# Anexe - descrierea detaliată a principalelor acțiuni de mobilitate

## Raport de deplasare

1. Solicitant: Dina Nicoleta Elena

2. Departamentul: Fizica Moleculară și Biomoleculară, Echipa de cercetare: Tehnologii Moleculare și Biomoleculare

3. Tipul acțiunii: VS (Visiting Scientist)

4. Scopul deplasării: consolidarea colaborării cu grupuri de cercetare pe tematica “Detecția și maparea comunicării celulare de tip *quorum sensing* în biofilme prin SERS”

5. Destinația: München, Germania

6. Perioada: 17.09. – 02.10.2020

7. Necesitatea, beneficiile și rezultatele deplasării:

Comunicarea celulară de tip *quorum sensing* la nivelul comunității unui biofilm de microorganisme a atras un interes extraordinar în comunitățile științifice și tehnologice. Studiile au arătat că în mod natural bacteriile există sub formă de biofilme în interiorul cărora se creează o comunicare intercelulară prin eliberarea de molecule cu rol de *semnalizare*, ca și mecanism de apărare. Astfel, microorganismele monitorizează și influențează nivelul de densitate celulară, al stresului extern resimțit de populație și de asemenea virulența sau accelerarea creșterii acesteia. De curând s-a început investigarea acestui tip de comunicare *quorum sensing* prin utilizarea unor noi metode (molecular biologice și totodată și spectroscopice de înaltă sensibilitate) și materiale (substrate metalice cu proprietăți plasmonice, nanostructuri fabricate în prezența bacteriilor prin biosinteză). Cel mai simplu și totodată eficient tip de substrat metalic SERS-activ ce ar putea fi reprodus și în cadrul departamentului nostru a fost identificat ca fiind cel de aur în film subțire, depus pe substrat de sticlă. Astfel, după un proces sistematic de optimizare a condițiilor de depunere cu un sistem Blazers de sputtering în incintă aflată sub vid. Acest tip de substrat este folosit la scară largă pentru obținerea de semnături spectrale specifice biomoleculelor și respectiv microorganismelor, sub acțiunea laserului, ca metodă alternativă pentru platforme senzitive de detecție în domeniul biotehnologiilor. Sperăm să fie eficient și în detecția SERS a moleculelor *semnalizatoare* prezente în biofilme, în concentrații reduse.

De obicei astfel de substrat metalice sunt tratate prin reacții chimice pentru a obține o suprafață funcționalizată (cu anticorpi, antigene, aptameri) ce apoi este utilizată în aplicații biomedicale.

Din acest motiv s-a reluat colaborarea cu grupul de cercetare al Prof. Dr. Christoph Haisch, Institut für Wasserchemie - Technische Universität München, Germania. În acest grup s-a dezvoltat deja un protocol de detecție a microorganismelor atât prin spectroscopia Raman cât și a efectului SERS al acesteia, dat de suprafață. Mai mult, spectrometrul WITec de care dispune grupul este extrem de sensibil în medii complexe cum sunt probele reale ce conțin biofilme.

Colaborarea s-a realizat pe două direcții:

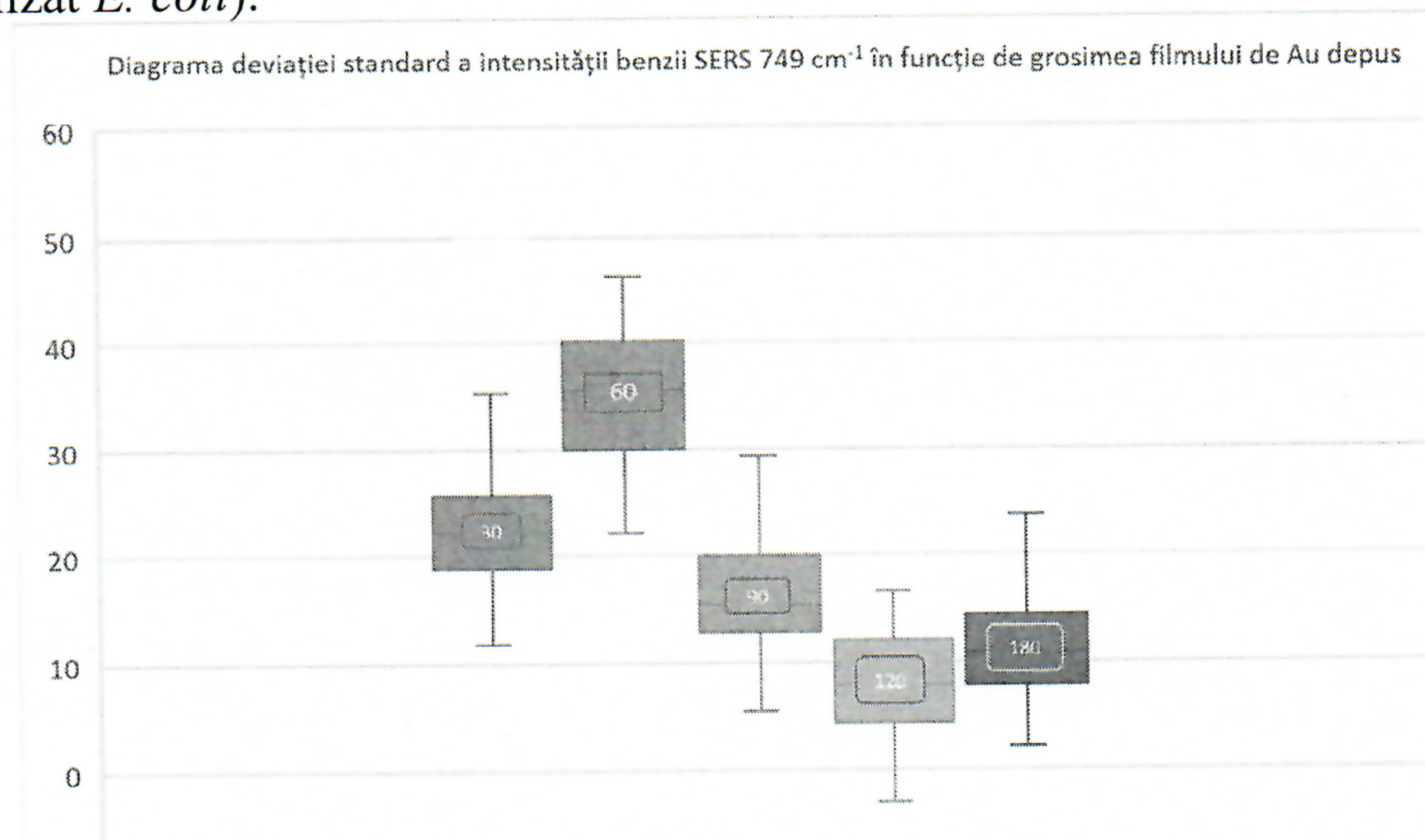
(i) caracterizarea filmelor subțiri de Au depuse prin tehnica de sputtering prin microscopie și prin evaluarea randamentului acestora în condiții experimentale de efect SERS;

(ii) detecția piocianinei în biofilm de *P. aeruginosa* cu ajutorul substratelor metalice de Au depuse și caracterizate anterior utilizând tehnica ultrasenzitivă SERS.

**Rezultate obținute:**

Filmele de Au au fost inițial investigate și caracterizate în perioada vizitei de lucru prin microscopie optică în termeni de transparență și prin măsurători Raman/SERS în termeni de eficiență (factor de amplificare obținut în funcție de grosimea nanometrică a substratului) -**Fig. 1.**

Intensitatea relativă a benzii marker SERS  $749\text{ cm}^{-1}$ , prezentă în semnătura spectrală a bacteriilor a fost corelată cu parametrii utilizați în procesul de depunere pentru a continua experimentele doar cu substratul optim pentru efectul SERS pentru alte specii bacteriene (inițial ca specie model s-a utilizat *E. coli*).



**Fig. 1.** Diagramă ce demonstrează că cea mai stabilă și ridicată valoare a intensității benzii marker  $749\text{ cm}^{-1}$  este obținută în cazul substratului de Au depus timp de 60s. Din curba de calibrare a aparatului de sputtering folosit (Blazers SCD004), rezultă că în funcție de timpul folosit pentru depunere, grosimea filmului subțire de Au diferă cu aprox. câțiva nm (de la  $<10\text{ nm}$  până la un maxim de  $25\text{ nm}$ ). Grosimea aprox. rezultată în acest caz (60s) este de  $10\text{ nm}$ . Pentru investigații de topografie a suprafeței și respectiv a gradului de rugozitate a filmului subțire depus, vom planifica măsurători de tip *microscopie de forță atomică (AFM)* în cadrul institutului INCDTIM în perioada imediat următoare. De asemenea, preconizăm că simulări de tipul *finite-difference time domain (FDTD)* referitoare la proprietățile plasmonice ale acestor filme subțiri de Au să ne susțină alegerea făcută pentru filmului subțire de 60s. Acest tip de calcule vor fi inițiate în curând în grupul *Procese Induse cu Laser* din INCDTIM. De asemenea, baza de date spectrale SERS achiziționate în cursul vizitei de lucru va fi analizată prin metode chemometrice moderne și robuste, pentru a pune în evidență calitatea rezultatelor obținute. Într-o formă finală, rezultatele vor fi publicate într-un jurnal de specialitate de impact ridicat în perioada următoare.

**Raport privind deplasarea în scopul formării profesionale la  
Centrul de Biologie al Academiei de Științe din České Budějovice, Republica Cehă.**

**1. Solicitant (solicitanți) / echipa de cercetare:** Dr. Tiberiu SZOKE-NAGY (E4 – Tehnologii Moleculare și Biomoleculare)

**2. Tipul acțiunii:** Formare Profesională (FP)

**3. Destinația / tematica / durata:**

- **Destinația:** Laboratorul de Ecologie Microbiană și Evolutivă, Departamentul de Ecologie Acvatică Microbiană, Institutul de Hidrobiologie, Centrul de Biologie al CAS České Budějovice, Cehia.
- **Tematica:** Noi tehnici de bioinformatică avansată și tehnologii de secvențiere de nouă generație pentru studierea interacțiunii microorganismelor din ecosisteme acvatice.
- **Durata:** 25 Septembrie 2020 – 1 Noiembrie 2020 (37 zile)

Metagenomica se poate defini la modul general ca parte a științelor biologice care se ocupă cu studierea genomurilor aparținând unei comunități biologice dintr-un anumit habitat. Prin genom se înțelege totalitatea materialului genetic (genelor și a informațiilor ereditare) aparținând unui organism (fie el unicelular precum bacteriile sau multicelular) sau unei entități biologice (fagi și virusuri). Altfel spus metagenomica este tehnica de recuperare a genomurilor microbiene (și nu numai) direct din probele de mediu sau clinice, indiferent de natura probei și abundența organismelor.

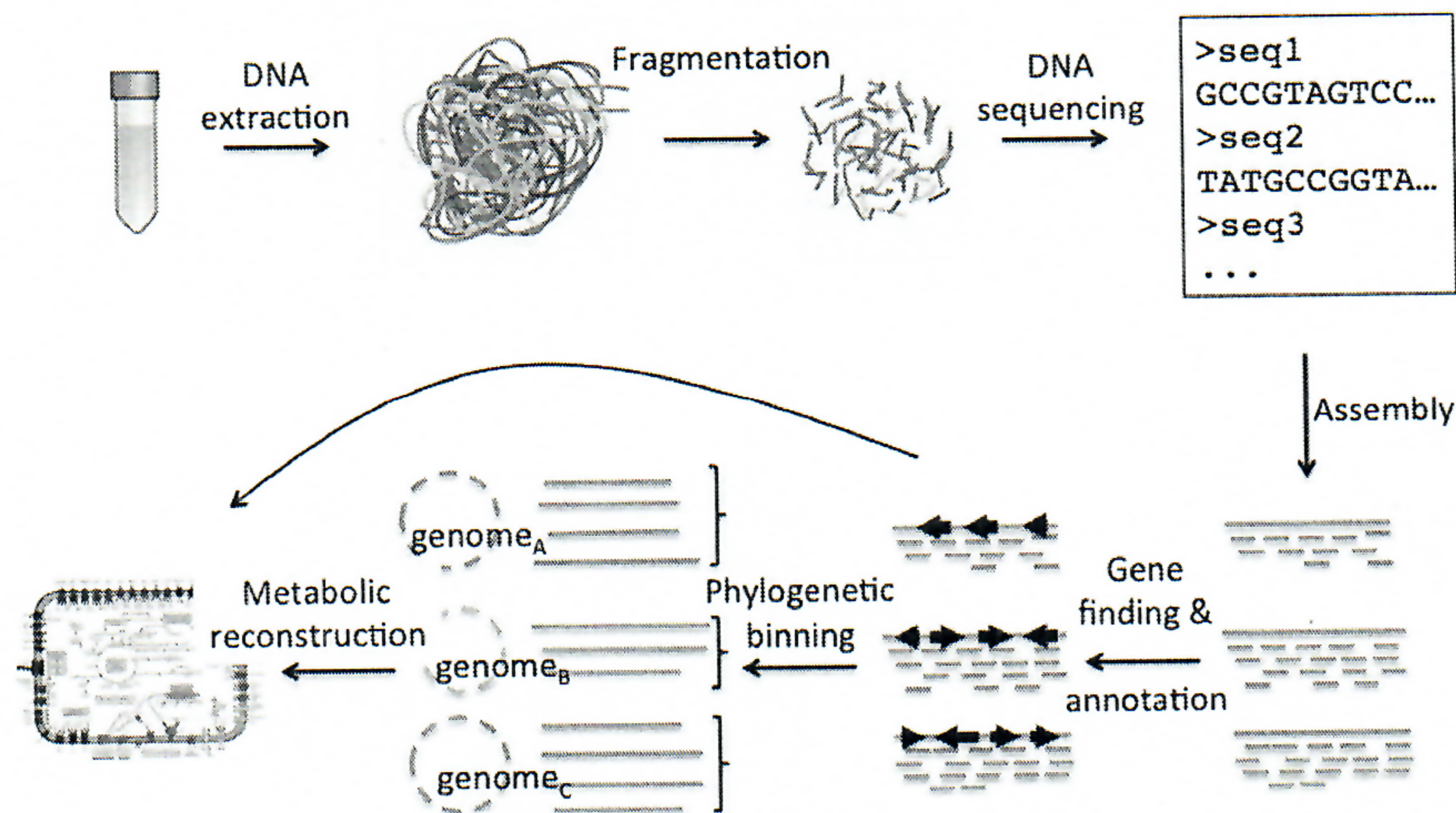
Analizele metagenomice aplicate probelor de mediu (Fig. 1) presupun explorarea întregii compoziții genetice a comunităților prezente în proba colectată prin: i) izolarea ADN total (metagenomică) sau ARN total (metatranscriptomică) din proba analizată și secvențierea acestuia folosind metode NGS (Next-Generation Sequencing); și ii) analiza bioinformatică folosind diverse aplicații sau algoritmi specifici pentru identificarea genelor (adnotare), asamblarea genomurilor și reconstrucția metabolică a organismelor prezente în proba analizată.

NGS cunoscută și sub denumirea de secvențiere de mare capacitate (en. high-throughput sequencing) este termenul general folosit pentru a descrie o serie de tehnologii moderne de secvențiere. Primul proiect de secvențiere completă a unui genom a fost proiectul genomului uman. În secvențierea genomului uman s-a folosit tehnologia de secvențiere cunoscută sub denumirea de secvențiere Sanger (secvențiere de primă generație). Datorită acestei tehnologii care prezintă o serie de dezavantaje și limitări, întreg genomul uman a fost secvențiat în 13 ani și costul total al acestuia a fost de aprox. 3 miliarde de dolari, fiind finalizat în anul 2003. Spre deosebire de secvențierea de primă generație, folosind NGS un genom uman ar putea fi secvențiat în mai puțin de o zi și la costuri infime de câteva mii de dolari. Principalele tehnologii

de secvențiere NGS fără a specifica caracteristicile și deosebiriile acestora sunt: Illumina (Solexa), Roche 454 (pirosecvențiere), Ion Torrent și Nanopore. Principalele avantaje ale tehnologiilor NGS sunt: i) nu este necesară cunoașterea *a priori* a structurii genomurilor; ii) oferă o rezoluție foarte bună chiar și de un singur nucleotid, ceea ce face posibilă detectarea genelor înrudite, transcripturilor cu splicing alternativ, a variantelor de gene alelice și a polimorfismului uninucleotidic; iii) necesită o cantitate mai mică de ADN/ARN (de ordinul nanogramelor); și iv) gradul sporit de reproductibilitate a rezultatelor.

Un studiu metagenomic poate avea două abordări diferite și anume: i) secvențierea ampliconică cunoscută sub denumirea de *metabarcoding* ce implică o etapă preliminară de amplificare PCR a unei gene marker de interes, abordare utilizată când se dorește identificarea taxonomică a comunității din proba analizată; și ii) secvențierea *shotgun* ce implică fragmentarea genomurilor și secvențierea ADN/ARN total din proba analizată, avantajul secvențierii *shotgun* spre deosebire de secvențierea ampliconică este că prin această metodă se pot obține și secvențele genelor marker care ulterior pot fi extrase și utilizate pentru identificarea taxonomică a comunității analizate.

Stagiul de formare profesională s-a realizat la Institutul de Hidrobiologie al CAS din České Budějovice, Republica Cehă și a fost axat pe trei aspecte ce vor fi detaliate în cele ce urmează și anume: i) familiarizarea în ceea ce privește lucrul cu seturi mari de date (zeci de milioane de secvențe); ii) asamblarea *de novo* a unui genom de *Escherichia coli* folosind secvențe disponibile în bazele de date rezultate în urma secvențierii NGS; și iii) identificarea comunității bacteriene dintr-un metagenom obținut din apa unui lac din Republica Cehă.



**Fig. 1.** Reprezentarea schematică a conceptului de metagenomică și prezentarea principalelor etape ale unui studiu metagenomic pentru reconstrucția căilor metabolice din proba analizată. (Sursa <http://envgen.github.io/metagenomics.html#main>).

1. **Lucrul cu seturi mari de secvențe** (sute de milioane de secvențe) presupune utilizarea unor programe/algoritmi care să ne permită conversia fișierelor, identificarea diferitelor caracteristici ale secvențelor, redimensionarea setului de date, extragerea anumitor secvențe pe baza unor informații. Desigur în cele ce urmează vor fi enumerați cei mai utilizați algoritmi/programe folosiți în stagiu.

- 1.1. **Convertseq** este un program care convertește diferite formate standard de secvențe. Acest soft este foarte util atunci când folosim o succesiune de programe care necesită anumite formate pentru a putea rula diferite analize.
- 1.2. **Lenseq** este folosit atunci când dorim să aflăm doar lungimea secvențelor dintr-un fișier. Programul funcționează cu o varietate mare de fișiere iar rezultatul este afișat pe 3 coloane, care includ ID-ul secvenței, lungimea și descrierea acesteia.
- 1.3. **GCseq** este similar cu lenseq dar spre deosebire de acesta, gcseq oferă ca și rezultat conținutul de GC (Guanină-Citozină) dintr-o secvență.
- 1.4. **Seqstat** oferă de asemenea informații despre lungimea și tipul secvențelor dintr-un fișier. Fișierul rezultat conține următoarele informații: Formatul fișierului, Tipul de secvență (Proteine, ADN sau ARN), Numărul de secvențe, Numărul total de resturi de nucleotide sau aminoacizi, Lungimea celei mai scurte și celei mai lungi secvențe și Lungimea medie a secvențelor.
- 1.5. **Reformat** utilizat când dorim să redimensionăm setul de date, de asemenea permite o prelevare randomică a secvențelor dintr-un fișier inițial.
- 1.6. **faSomeRecords** este utilizat pentru extragerea de secvențe din fișiere conținând milioane de secvențe pe baza unor criterii stabilite inițial.
- 1.7. **Foxhound2** este similar cu **faSomeRecords** dar avantajele față de acesta sunt reprezentate de rapiditatea cu care se realizează extragerea informațiilor din fișiere precum și faptul că suportă mai multe formate de secvențe.
- 1.8. Comenzile **head** și **tail** sunt utilizate când dorim să vedem începutul sau finalul unui fișier. Este utilizat frecvent pentru a ne asigura că fișierele rezultate după fiecare etapă au fost generate corect.
- 1.9. Filtrarea secvențelor se poate face cu ajutorul softurilor **daffy**, **sieve**, **keeplong**, **keepshort**, **lenfilter** sau **gfilter**. Cu ajutorul acestora se pot extrage secvențe în funcție de diferiți parametri precum: lungimea acestora sau conținutul de GC.
- 1.10. **Fa2aacomp** permite aflarea compoziției de aminoacizi dintr-o secvență, softul folosește formate fasta iar rezultatul oferit este tabelar și cuprinde: ID-ul secvenței, descrierea și lungimea acesteia precum și compoziția celor 20 de aminoacizi.

## 2. Asamblarea *de novo* a genomului la *E. coli*

Asamblarea genomului la *Escherichia coli* K12 sa realizat folosind softurile Spades vers. 3.14.1 varianta pentru Linux (link: <https://cab.spbu.ru/software/spades/>) sau Megahit vers. 1.2.9 varianta pentru Linux (link: <https://github.com/voutcn/megahit>). Aceste două softuri sunt gratuite și pot fi descărcate și folosite de la linkurile menționate. Evaluarea calității asamblării s-a realizat folosind softul Quast vers. 3.0 (link: <https://github.com/ablab/quast>).

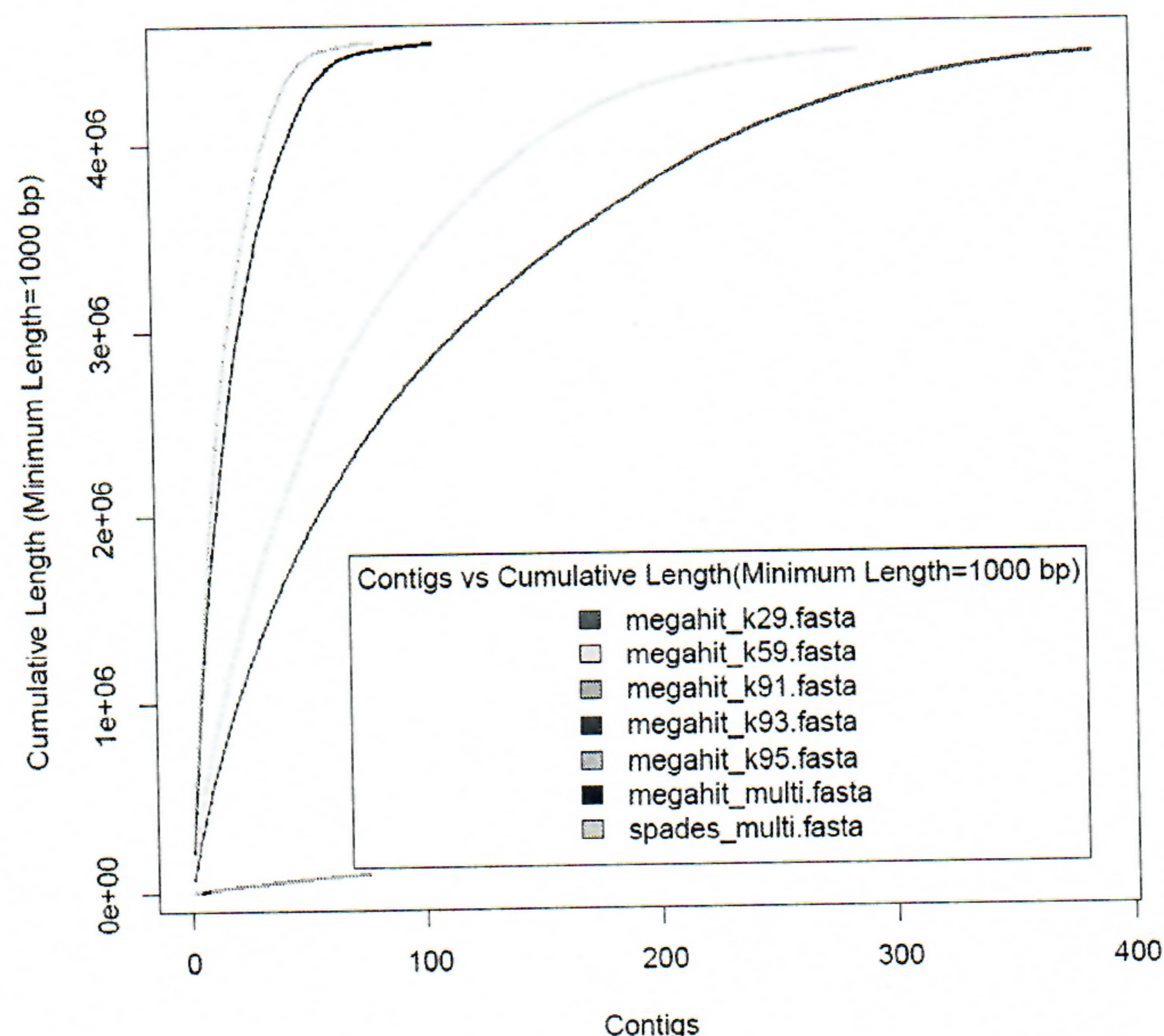
Pentru început au fost descărcate fișierele fastq ce conțin secvențele rezultate în urma secvențierii NGS. Fișierele forward (ERR022075\_1.fastq.gz) și reverse (ERR022075\_2.fastq.gz) pot fi descărcate de la linkul următor: <ftp://ftp.sra.ebi.ac.uk/vol1/fastq/ERR022/ERR022075/>. Ca și referință s-a utilizat genomul de la *E. coli* K12 MG1655 disponibil în NCBI și având codul de acces U0096.

După ce au fost descărcate fișierele conținând secvențele s-a folosit aplicația seqstat pentru a vedea conținutul fișierelor, astfel fișierele ERR022075\_1 și ERR022075\_2 conțin un număr de 22.720.100 secvențe, 2.272.010.000 nucleotide și o medie de 100 nucleotide per secvență (read). Fișierul de referință conține o singură secvență având lungimea de 4.641.652 nucleotide, aceasta fiind și lungimea genomului la tulpina *E. coli* K12 MG1655.

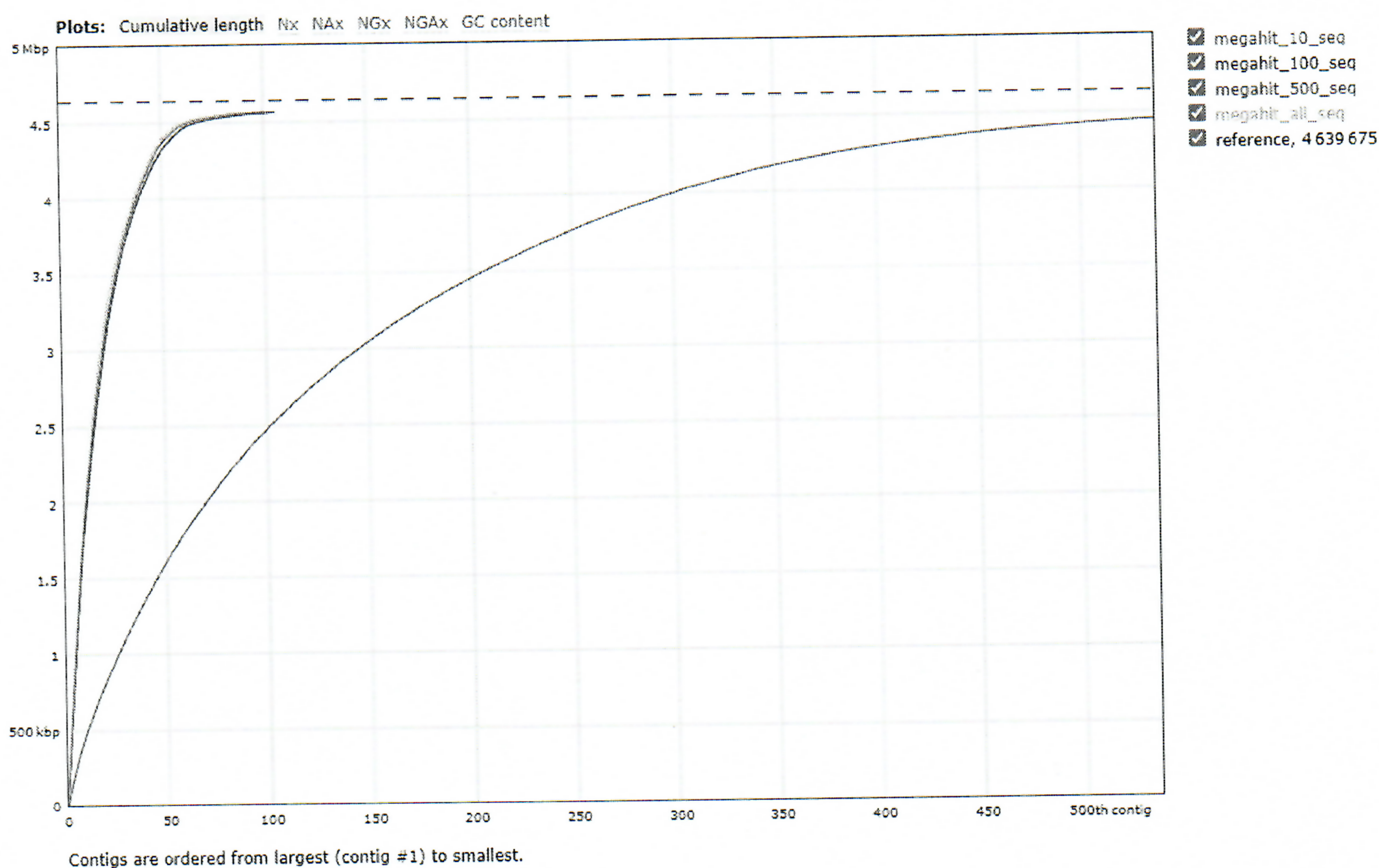
Următoarea etapă în procesul de asamblare este eliminarea ambiguităților și a regiunilor cu calitate slabă (Quality trimming). Controlul calității se poate realiza cu ajutorul softului seqtk trimfq sau bbdduk.sh din bbmap (<http://seqanswers.com/forums/showthread.php?t=42776>). Fișierele rezultate în urma acestei etape au următoarele caracteristici: i) ERR022075\_1 prezintă un număr de 22.502.287 secvențe, 2.163.429.273 nucleotide și o lungime medie a secvențelor de 96.1 nucleotide; iar ii) ERR022075\_2 prezintă un număr de 22.502.287 secvențe, 2.219.276.426 nucleotide și o lungime medie a secvențelor de 98.6 nucleotide.

După realizarea controlului calității, fișierele rezultate au fost folosite pentru asamblarea genomului. Asamblarea genomului s-a realizat comparativ folosind 2 abordări diferite: i) prima dată s-a asamblat genomul folosind k-meri unici de lungimi diferite și anume 29, 59, 91, 93 și 95 de nucleotide (Fig. 2) respectiv o succesiune a acestora și programul identifică cea mai bună variantă (multi); și ii) a doua-a a vizat redimensionarea setului inițial de secvențe astfel încât să avem o acoperire a genomului de 10 X, 100 X, 500 X și toate secvențele (Fig. 3).

După cum se poate observa din Fig. 2, cele mai bune rezultate au fost obținute cu Megahit și Spades în cazul în care s-a folosit o succesiune de K-meri (megahit\_multi.fasta – negru și spades\_multi.fasta – gri), respectiv când setul de date folosit are o acoperire a genomului de minim 100 X (Fig. 3). Obiectivul unei asamblări reușite este să se ajungă în faza de platou folosind cât mai puține contiguri posibile, ideal ar fi 1 (ceea ce înseamnă că genomul asamblat este reprezentat de un singur contig). Prin redimensionarea setului inițial de date s-au putut asambla genomuri, acestea având 95,835% și 98,295% nucleotide comparativ cu genomul de referință.



**Fig. 2.** Asamblarea genomului la *Escherichia coli* K12 folosind k-meri unici și o combinație a acestora. Contigurile cu lungime mai mică de 1000 bp au fost eliminate din grafic.



**Fig. 3.** Asamblarea genomului la *Escherichia coli* K12 folosind megahit rezultat în urma redimensionării setului inițial de secvențe la o acoperire de 10 X, 100 X, 500 X și toate secvențele.

### 3. Identificarea comunitatii bacteriene dintr-o probă de apă

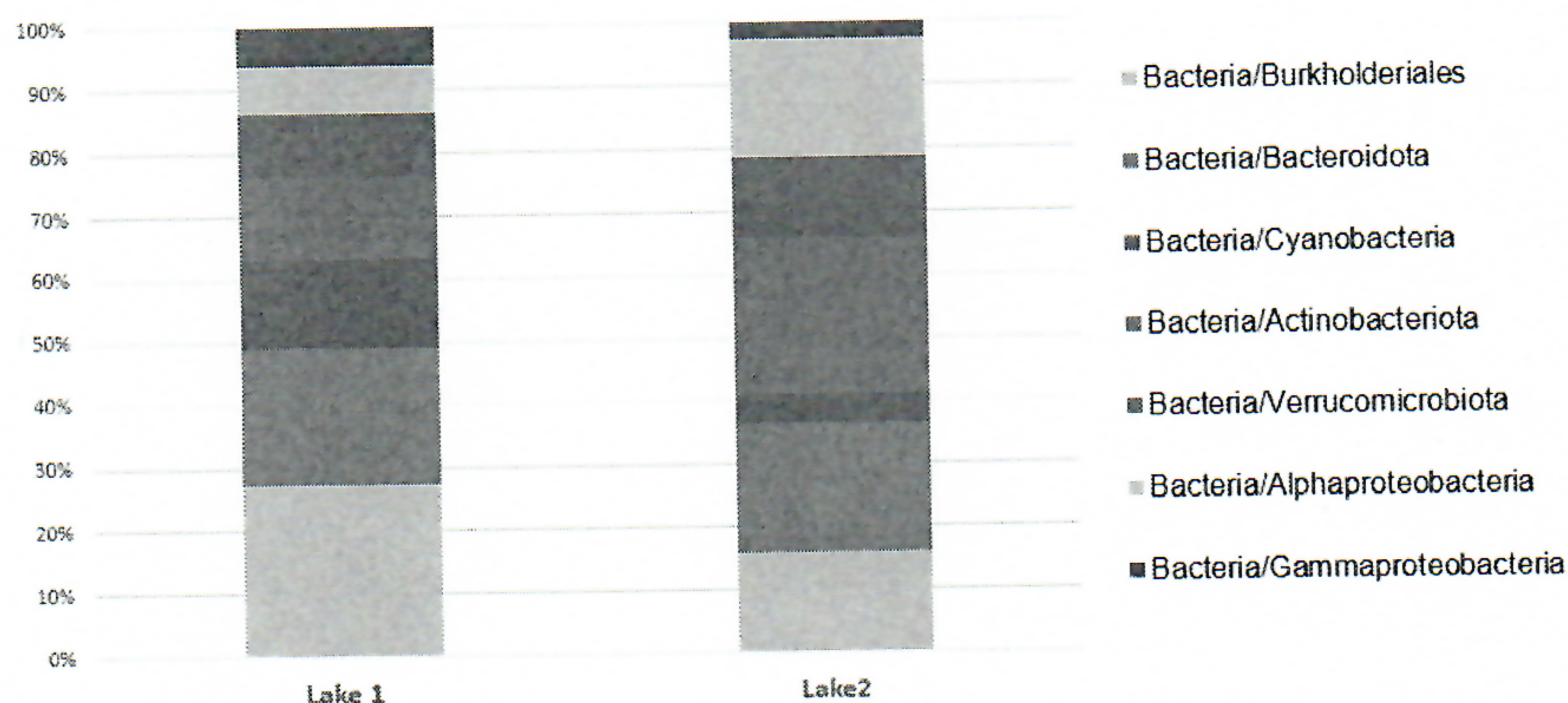
Identificarea secvențelor de ARNr 16S s-a realizat folosind un metagenom recuperate din apă unui lac din Cehia. Pentru comparație setul inițial de secvențe a fost redimensionat la 10, 50 de milioane secvențe respectiv tot setul de date.

Înainte de redimensionarea setului de secvențe, acestea au fost supuse unui control de calitate după cum am menționat anterior. Ca și referință s-a utilizat baza de date Silva

SSURef\_NR99 disponibilă pentru a putea fi descărcată și utilizată la link-ul următor: [https://www.arb-silva.de/no\\_cache/download/archive/current/Exports/](https://www.arb-silva.de/no_cache/download/archive/current/Exports/).

Căutarea secvențelor de 16S dintr-un metagenom s-a realizat folosind softul mmseq2, disponibil aici: <https://github.com/soedinglab/mmseqs2/wiki>. Căutarea secvențelor cu mmseq2 este similară unei căutări blastn, dar implementarea mmseq2 oferă avantajul obținerii mai rapide a rezultatelor. Linia de comandă pentru mmseq2 folosită pentru identificarea secvențelor de 16S este: `./mmseq2 tipul_căutării (easy-search) fișier_inițial.fasta baza_de_date.fasta rezultat.txt` Foldertemporar –optiuni. Rezultatul obținut este sub forma unui fișier având formatul m8, delimitat prin tab.

Din fisierul rezultat în urma analizei cu mmseq2 se extrag doar secvențele (readurile) care conțin secvențe referitoare la 16S cu ajutorul programelor faSomeRecords sau foxhound2. În urma acestei procesări am obținut un număr de aproximativ 13.000 secvențe potențiale de 16S dar care conțin și secvențele de 18S (eucariote) respectiv 16S de la Archaea. Gruparea acestora se realizează folosind softul ssu-align (link: <http://eddylib.org/software/ssu-align/>) rezultând fișiere de tipul archaea.fa, bacteria.fa și eukarya.fa. Fișierele rezultate sunt folosite împreună cu silva-sloth pentru identificarea taxonomică a secvențelor extrase din metagenom. Reprezentarea grafică a principalelor grupe taxonomice este redată în Fig. 4.



**Fig. 4.** Principalele grupe taxonomice de bacterii prezente în metagenomurile analizate.

Informațiile și cunoștințele dobândite în urma deplasării vor fi utilizate pentru realizarea unui model experimental/procedeu despre asamblarea *de novo* a genomurilor bacteriene unde vor fi detaliați pașii ce trebuie parcurși pentru asamblarea genomurilor și pentru dezvoltarea de noi direcții de cercetare în cadrul institutului în concordanță cu strategia actuală și viitoare de dezvoltare a INCDTIM.

# RAPORT VIZITĂ DE LUCRU

**Nume, prenume:** Dr. Mihaela Streza

**Numele instituției in care s-a efectuat deplasarea:**

Université du Littoral, Côte d'Opale (ULCO) , Dunkerque, Franta

**Departamentul:**

Laboratorul de Dinamica Moleculara si Structura a Materialelor (UDSMM)

**Perioada:**

05.10.2020-09.11.20200

**Sursa de finantare:** Proiect de dezvoltare institutionala *PN-III (Subprogramul 1.2 -Dezvoltare Institutională)*, cod proiect 32PFE/19.10.2018.

Vizita de lucru s-a efectuat in cadrul **axei 1** de cercetare (fenomene de transport termic) din cadrul Laboratorului de Dinamica Moleculara si Structura a Materialelor (UDSMM), Dunkerque.

Expertiza castigata de membrii grupului prof. AH Sarhaoui a permis dezvoltarea diferitelor tehnici de caracterizare fototermica (fotopiroelectricitate la temperatura ambianta si in domeniul criogenic, fototermoelectricitate, radiometrie in infrarosu, detectie fotoacustica, termorefectanta, calorimetrie adiabatica), domeniu in care laboratorul UDSMM este recunoscut international. Aceste tehnici vizeaza studierea fenomenelor de transport termic in diferite materiale si dispozitive tehnice in vederea cresterii performantelor si a fiabilitatii acesora.

## SCOPUL VIZITEI

Vizita de lucru a avut ca scop consolidarea cooperarii cu partenerul strain pe o tematica strategica a INCDTIM – si anume **producerea si caracterizarea materialelor cu aplicatii in domeniul stocarii/conversiei de energie** (materiale mezoporoase utilizate pentru stocarea H<sub>2</sub>, respectiv filme subtiri termoelectrice). Aceste materiale pot fi caracterizate dpdv termic prin tehnici specifice existente in cadrul UDSMM. (**calorimetrie PPE in domeniul criogenic**, radiometrie fototermica ).

**In cadrul acestei deplasari am continuat masuratorile de caracterizare termica** ale unor MOF-uri sintetizate in cadrul INCDTIM Cluj (masuratori demarate la temperatura ambianta in cadrul primei vizite de lucru prin tehnica de radiometrie fototermica). In acest stadiu de lucru am utilizat **calorimetria fototermica in domeniul criogenic** pentru determinarea efuzivitatii termice a materialelor poroase investigate, deoarece aceste materiale sunt interesante din punct de vedere al adsorbiei de hidrogen in domeniul temperaturilor joase (-175K).

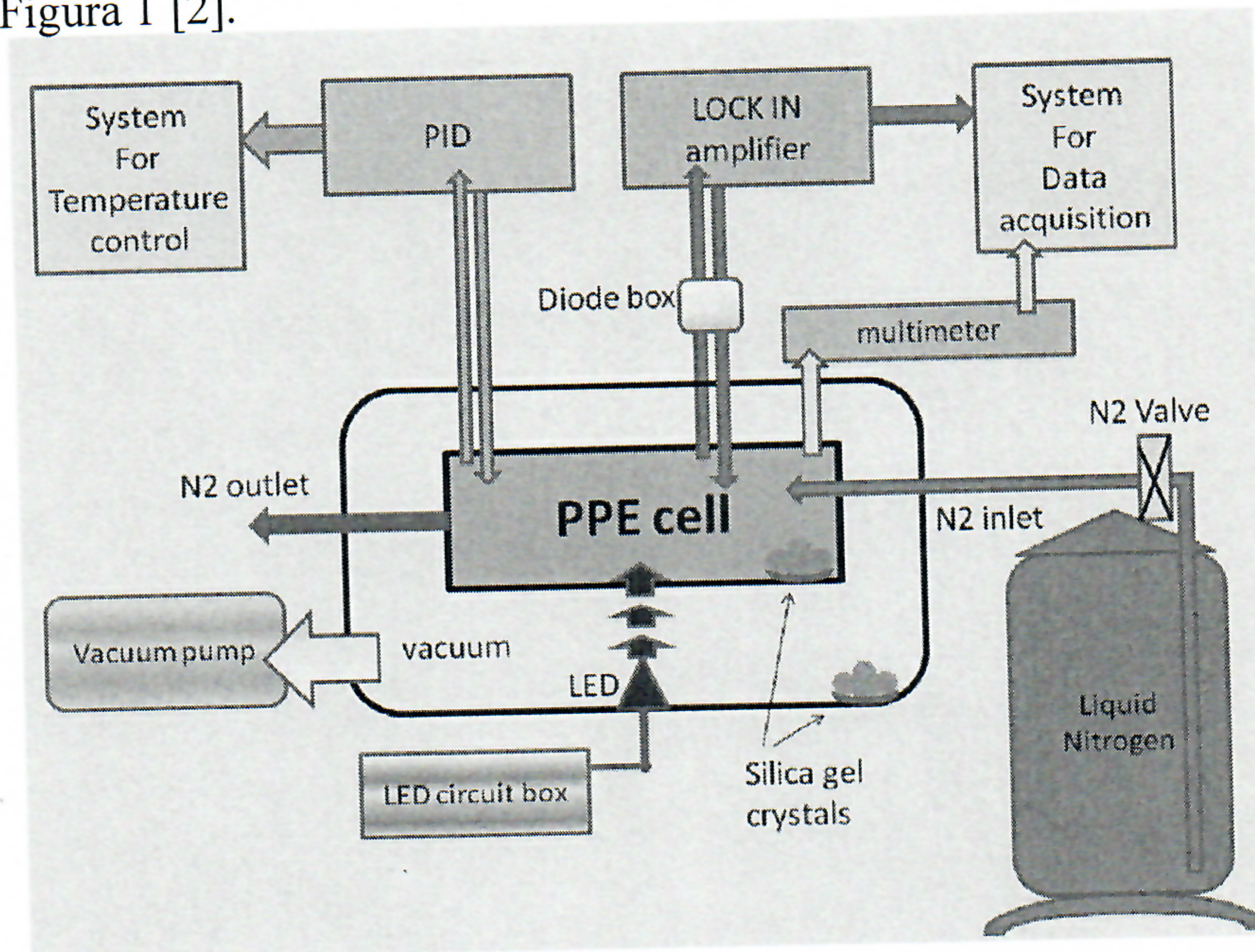
## ACTIVITATI DESFASURATE

1. Implementarea unei noi metode de determinare a efuzivitatii termice a solidelor poroase prin calorimetria PPE in configuratie directa, fara utilizarea unui fluid de contact intre proba analizata si senzorul pyroelectric (LiTaO<sub>3</sub> avand o grosime de 240microni).
2. Realizarea programului de fit in Matlab pentru analiza datelor experimentale.
3. Efectuarea de teste preliminare la temperatura ambianta pentru materiale etalon (e.g Teflon)
4. Efectuarea de teste preliminare in domeniul criogenic pentru materiale etalon (e.g. Teflon)
5. Reducerea zgomotului pentru semnalul pyroelectric in domeniul criogenic si la frecventa joasa de modulare
6. Realizarea curbelor de normalizare aer/pyro/aer pentru urmatoarele temperature: 25C, -10C, -35C, -65C, -80C, -95C, -125C, -140C, -155C, -175C, in intervalul de frecventa [0.5Hz – 100Hz];
7. Realizarea masuratorilor pentru probele MIL101 si MIL101-G10% pentru temperaturile: 25C, -10C, -35C, -65C, -80C, -95C, -125C, -140C, -155C, -175C, in intervalul de frecventa [0.5Hz – 100Hz];

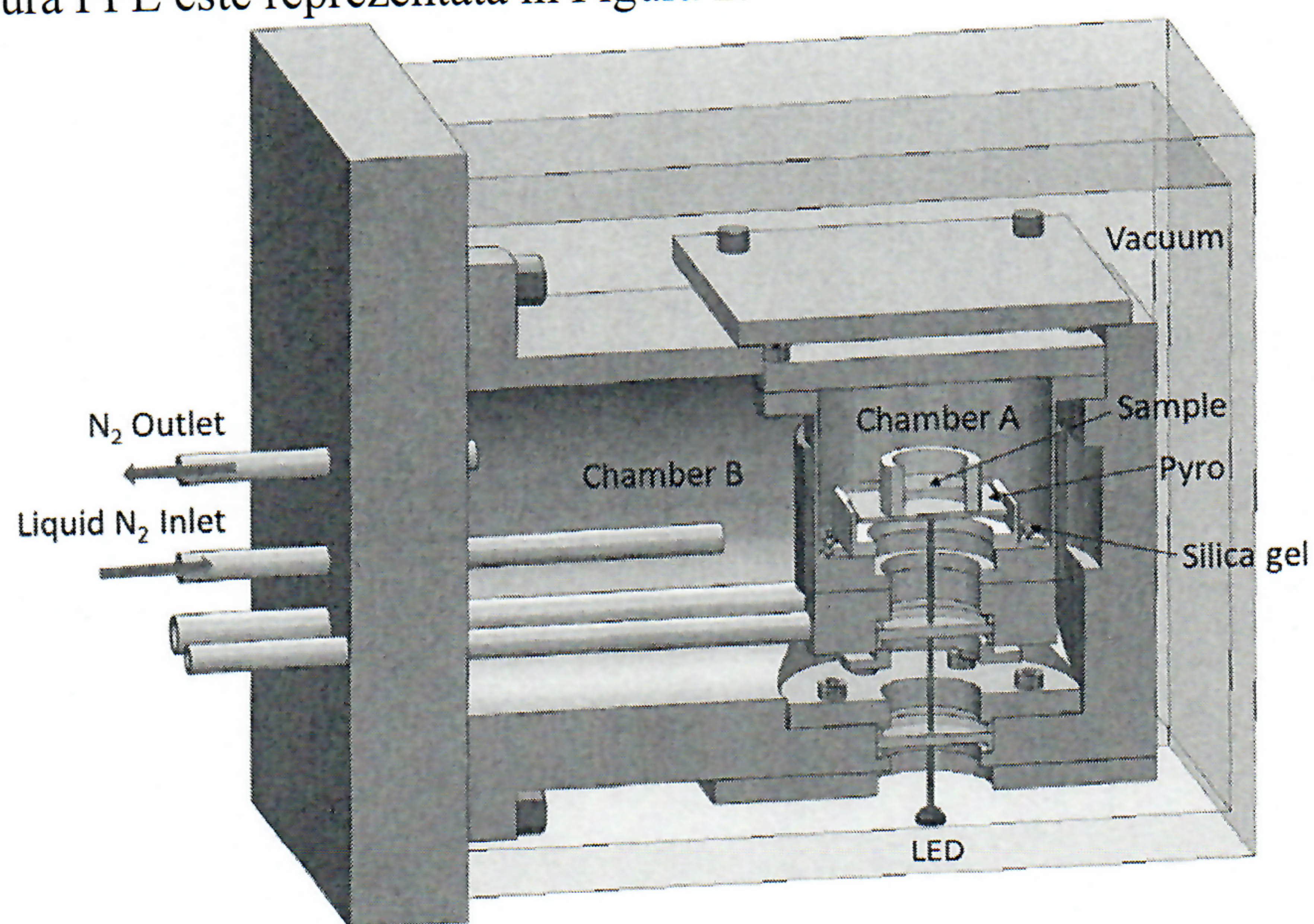
8. Fitarea datelor experimentale cu modelul teoretic propus si analiza rezultatelor obtinute.

### DESCRIEREA LINIEI EXPERIMENTALE DE MASURA

Efuzivitatea termică a pastilelor (grosime 6mm) a fost măsurată prin calorimetrie fotometrică la temperatura ambianta si in domeniul criogenic. Diagrama liniei experimentale de masura este reprezentată în Figura 1 [2].



Celula de masura PPE este reprezentata in Figura 2.



In camera A se gasesc senzorul piroelectric si proba, in timp ce camera B a fost utilizată pentru circulația azotului lichid. Camera A se gaseste fixată în interiorul camerei B, asigurandu-se izolarea completă a senzorului și a probei la fluxul de azot lichid. In felul acesta efectul piezoelectric in cristalul pyroelectric este puternic diminuat. Senzorul pyroelectric este un cristal de  $\text{LiTaO}_3$  opac, avand o grosime de 240microni. Camera A a fost adaptată pentru ambele configurații PPE (directa si inversa). In cazul de fata am facut masuratorile PPE in configuratia de masura inversa, senzorul piroelectric fiind iradiat de catre sursa LED modulata in intensitate, proba analizata fiind depusa direct pe senzor. Fluidul de cuplare intre proba si senzor a fost aerul [1]. Aceasta configuratie de masura a permis evitarea utilizarii unui fluid de contact intre materialul poros analizat si senzor, care pe de o parte ar fi contaminat proba si pe de alta parte ar fi suferit o tranzitie de faza (inghetare) la temperatura criogenica, ceea ce ar fi condus la obtinerea unor valori gresite ale efuzivitatii termice a materialului poros.

Fiecare măsurare a fost un set de două experimente, primul fără eșantion (aer/pyro/aer) și al doilea cu probă (aer/pyro/proba). S-a făcut o normalizare a semnalului măsurat cu proba ,

respectiv fara proba, pentru a se anula dependenta semnalului de contributi electronice si de iluminare. Iluminarea a fost realizata din partea de jos a celulei, prin fereastra de sticla, care are rolul de a mentine vidul intre cele 2 camere si care permite trecerea radiatiei LED catre senzor. Intreaga celulă a fost mentinuta in vid.

Intreaga celula PPE este stabilizata in temperatura prin intermediul unui colier sofant si al unei placi sofante prin intermediul unui sistem PID de control al temperaturii (proportional-integral-derivative *controller*). De asemenea, temperatura in jonctiunea de emisie a LED ului este mentinuta constanta prin intermediul a 2 rezistente controlate PID. Controlul PID al temperaturii permite mentinerea echilibrului termic in celula PPE sub flux de azot, obtinandu-se in felul acesta izoterme la diferite temperaturi.

Radiatia **LED** modulata creaza o variatie de temperatura modulata in senzorul pyroelectric care va induce o modificare a polarizarii cristalului pyroelectric ce va genera o diferenta de potential periodica in senzorul pyroelectric. Aceasta diferenta de potential este masurata utilizand un amplificator de detectie sincrona. Semnalul masurat este unul complex, iar amplitudinea si faza acestui semnal, inregistrate de catre detectorul sincron, permit determinarea efuzivitatii termice a backingului.

### REZULTATE OBTINUTE

In figura 3 sunt prezentate doua izoterme la o temperatura medie de  $-174^{\circ}\text{C}$ . Diferenta de temperatura intre cele 2 izoterme este data de pozitionarea diferita a celor 2 sonde in celula de detectie. La aceasta temperatura au fost realizate curba de normalizare aer/pyro/aer respectiv curba corespunzatoare configuratiei aer/pyro/MOF 101 (densitate  $040\text{g}/\text{cm}^3$ ).

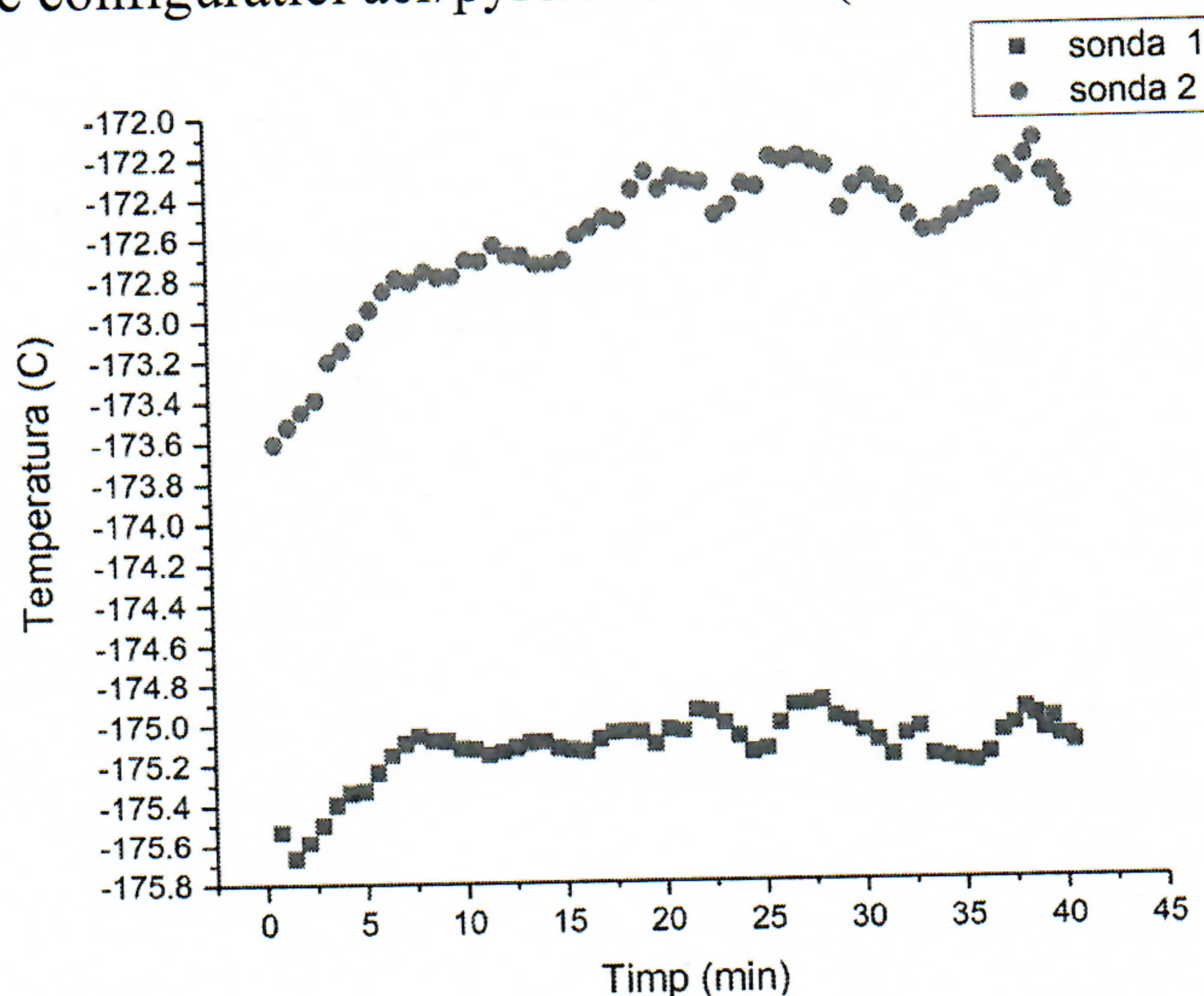
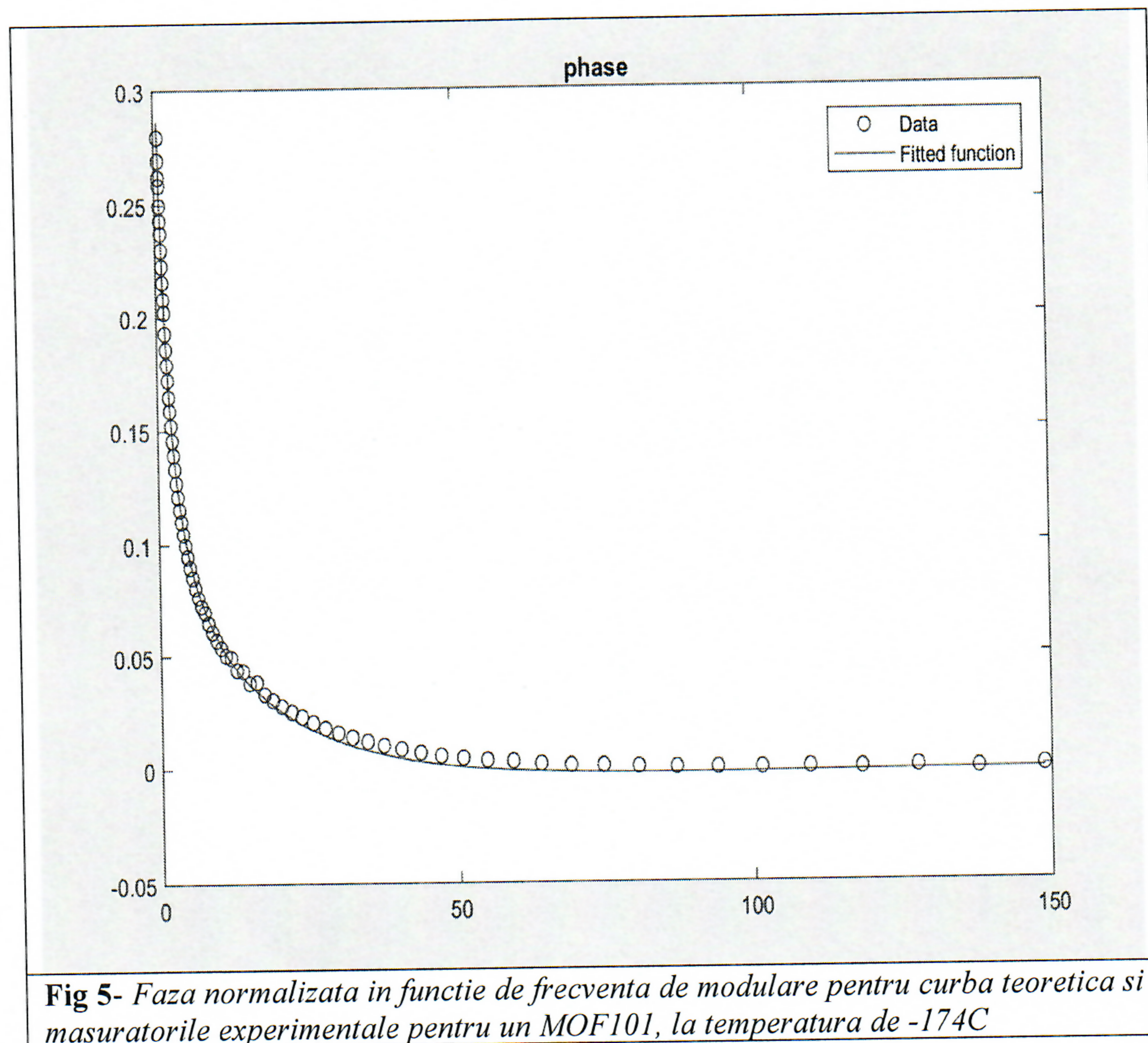
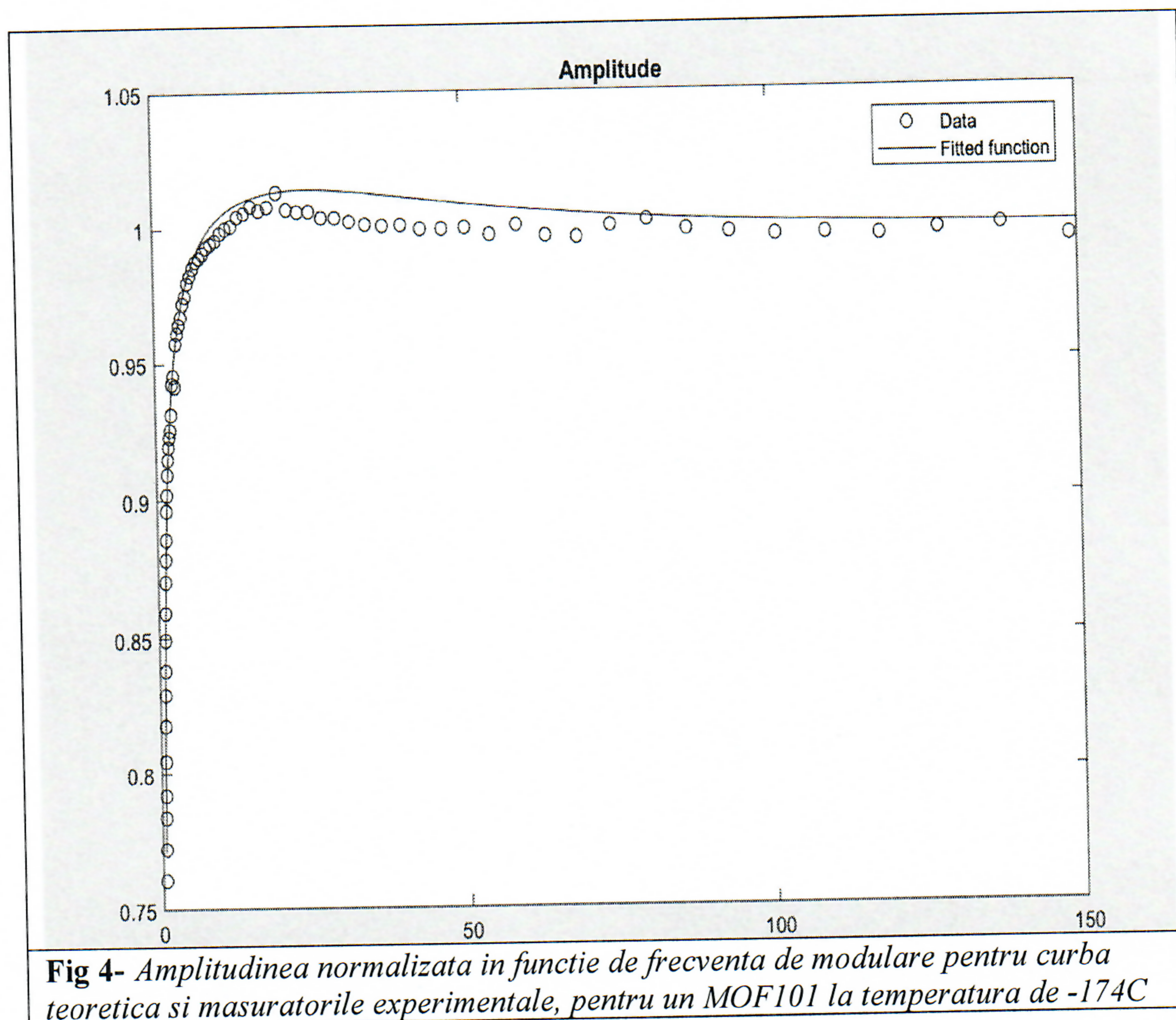


Fig. 3- Izoterma corespunzatoare temperaturii de  $-174^{\circ}\text{C}$

Amplitudinea respectiv faza normalizata in functie de frecventa de excitare la temperatura de  $-175^{\circ}\text{C}$ , pentru un esantion de tip MOF 101 ( $\rho=040\text{g}/\text{cm}^3$ ) sunt prezentate mai jos:



Pentru proba masurata la temperatura de -175C s-a obtinut o valoare a efuzivitatii termice  $e=160\text{W/mK}$  (fitul a fost realizat simultan cu amplitudinea si faza semnalului normalizat).

Acelasi tip de masuratori a fost efectuat pentru toate temperaturile intermediare cuprinse intre 25C si -175C. S-a observat o lejera scadere a valorii efuzivitatii termice de la  $e=330\text{W/mK}$  la temperatura ambianta, la  $e=160\text{W/mK}$  la temperature de -175C.

Dificultatea majora a acestor masuratori a constat in realizarea izotermelor in domeniul criogenic si obtinerea unui semnal pyroelectric fara zgomot, la temperatura si frecventa joasa. Mentionam ca aceste tipuri de masuratori sunt realizate in premiera pentru aceste tipuri de material prin tehnica PPE in domeniul criogenic.

Masuratorile urmeaza sa fie extinse la alte tipuri de materiale utilizate in stocarea de H<sub>2</sub>. Calorimetria PPE in configuratie directa, cu proba subtire termic, va permite determinarea difuzivitatii termice a acestor materiale. Prin urmare, combinarea celor 2 configuratii PPE de detectie (front/back) va permite caracterizarea completa a MOF-urilor in domeniul criogenic. In final se va obtine conductivitatea termica a acestor material pe tot domeniul criogenic de temperature.

### **Bibliografie:**

1. Agustín Salazar & al . *Thermal effusivity measurements of thermal insulators using the photopyroelectric technique in the front configuration*, MEASUREMENT 121 (2018), pp 96-112
2. A. Matthew, F. Gutier, *Determination of glass transition temperature using temperature dependent signal from a cryogenic photopyroelectric instrument*, THERMOCHIMICA ACTA 676 (2019).