

Contractor : INSTITUTUL NATIONAL DE CERCETARE-DEZVOLTARE
 PENTRU TEHNOLOGII IZOTOPICE SI MOLECULARE - INCDTIM
 Cod fiscal : RO 13221445

RAPORT ANUAL DE ACTIVITATE
privind desfășurarea programului nucleu
TEHNOLOGII IZOTOPICE ȘI MOLECULARE: DE LA CERCETARE-DEZVOLTARE LA INOVARE –
IZOMOL (PN16-30)
anul 2016

Durata programului: 2 ani

Data începerii: 11.03.2016

Data finalizării: 31.12.2017

1. Scopul programului: Cresterea capacității de inovare a INCDTIM prin stimularea activităților CDI cu caracter aplicativ, și orientarea lor înspre rezolvarea de probleme societale și înspre satisfacerea cererii de transfer tehnologic și de cunoștințe.

2. Modul de derulare al programului:

2.1. Descrierea activităților (utilizând și informațiile din rapoartele de fază, Anexa nr. 9)

Proiectul PN16-30 01 01: Noi aplicații ale tehnologiilor izotopice

<p>Faza 1: Marcarea izotopica selectiva cu ^2H a derivatilor catecolici pentru dezvoltarea de materiale noi, cu aplicabilitate in domeniul industriei medicale</p>	<p>Activitati:</p> <p>593.2.2 Am optimizat și implementat o noua metoda de laborator pentru obtinerea HCl deuterat (>99%) necesar in procesul de sinteza a derivatilor de catecol marcati izotopic cu deuteriu. Pentru aceasta am parcurs urmatoarele etape:</p> <ol style="list-style-type: none"> i. Am efectuat un studiu de literatura pentru a putea identifica metoda optima de preparare a HCl deuterat: am ales in final metoda de obtinere din clorura de benzoil și apa deuterata – comparativ cu metodele traditionale, are avantajul ca necesita o instalatie tehnologica cu un singur reactor, are costuri finale mai reduse, iar produsul secundar poate fi valorificat pentru obtinerea de esteri benzoici ii. Am construit instalatia de laborator aferenta iii. Am optimizat reactia din punct de vedere al raportului dintre reactanti, timpului și temperaturii de reactie și al randamentului global, folosind compusi nemarcati izotopic; in final, s-a verificat reproductibilitatea randamentului iv. Am utilizat metoda optimizata in urma careia am obtinut acidul clorhidric cu grad de deuterare > 99%; gradul de deuterare s-a determinat prin spectroscopie RMN <p>593.2.2 Am implementat și optimizat tehnologia de laborator pentru sinteza catecolului și a derivatilor <i>acid 2-amino-3-(3,4-dihidroxifenil)-propanoic, 4-(2-aminoetil)benzen-1,2-diol</i>, marcati izotopic cu deuteriu. Pentru aceasta am parcurs urmatoarele etape:</p> <ol style="list-style-type: none"> i. Am testat sinteza și purificarea in laborator a derivatilor de catecol marcati izotopic in pozitiile de interes prin intermediul unei reactii de schimb izotopic in apa deuterata și in prezenta HCl deuterat (obtinut in etapa anterioara)
---	--

	<ul style="list-style-type: none"> ii. Am implementat metoda de masura a gradului de deuterare: s-a ales spectroscopia RMN pe lichide in prezenta unui standard intern, deoarece are un grad inalt de selectivitate asupra pozitiilor chimice distincte din molecula iii. Am efectuat un studiu sistematic al cineticii schimbului izotopic in functie de timpul de recatie pentru toti cei trei compusi investigati, pentru a determina conditiile de deuterare selectiva pe cele trei pozitii distincte ale inelului catecolic iv. Am corelat rezultatele analitice cu datele experimentale de sinteza in vederea optimizarii metodologiei de marcare izotopica cu deuteriu a fiecaruia dintre derivatii de catecol investigati <p>3. Am intocmit raportul de faza sintetic si fisele CDI aferente indicatorilor de rezultat obtinuti (componente ale raportului de faza <i>in extenso</i>): metoda (1), tehnologie de laborator (1), produse (3)</p>
<p>Faza 2: Autentificarea medicamentelor pe baza amprentei izotopice a carbonului ($^{13}C/^{12}C$) si azotului ($^{15}N/^{14}N$)</p>	<p>Activitati:</p> <p>593.0.0 S-a dezvoltat si validat o noua metoda analitica de autentificare a medicamentelor. S-au putut diferentia atat ehaviours provenind de la firme diferite, cat si medicamente ehavio in aceeasi unitate, dar in loturi diferite. S-au derulat urmatoarele activitati:</p> <ul style="list-style-type: none"> i. S-au analizat 38 de probe farmaceutice, grupate in sase tipuri de antiinflamatoare nesteroidiene, provenind de la diferiti producatori, prin spectrometria de masa de rapoarte izotopice (^{13}C si ^{15}N); ii. S-a validat metoda determinand precizia exprimata in parametri statistici de performanta: repetabilitate si reproductibilitate pentru $\delta^{13}C$; iii. S-a determinat continutul contaminantilor elementali prin tehnica ICP-MS (V, Mn, As, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Cd, Sb, Pb, etc) iv. S-au facut corelari intre determinarile izotopice si elementale utilizand analiza discriminantului liniar, LDA <p>2. Am intocmit raportul de faza sintetic si fisele CDI aferente indicatorilor de rezultat obtinuti (componente ale raportului de faza <i>in extenso</i>): metoda (1), baza de date (1)</p>
<p>Faza 3: Amprentarea izotopică a fructelor de pădure din zona Transilvaniei</p>	<p>Activitati:</p> <p>593.0.0 S-a efectuat prima amprentare izotopica a fructelor de padure din Transilvania. Pentru atingerea acestui obiectiv s-au desfasurat urmatoarele activitati:</p> <ul style="list-style-type: none"> i. S-au determinat raportele izotopice ale oxigenului ($^{18}O/^{16}O$) respectiv a hidrogenului ($^2H/^1H$) din apa extrasa din fructe de padure reprezentative pentru zona Transilvaniei. ii. S-a determinat raportului izotopic al carbonului ($^{13}C/^{12}C$) din fructele de padure cu ajutorul CF-IRMS. iii. S-a determinat profilul elemental al probelor investigate iv. S-a initiat prima baza de date care contine valorile izotopice si concentratia elementală a fructelor de padure din Transilvania. v. S-au testat probe comerciale in vederea autentificarii acestora in raport cu originea geografica. vi. Au fost identificati cei mai buni markeri de discriminare ai tipului de crestere utilizat (salbatic vs. Cultura) prin coroborarea rezultatelor izotopice si a profilului elemental. <p>2. Am intocmit raportul de faza sintetic si fisele CDI aferente rezultatelor</p>

obținute (componente ale raportului de faza *in extenso*): baza de date (1).

Proiectul PN16-30 01 02: Tehnologii avansate pentru producere, recuperare și stocare de energie

Faza 1: Proiectarea geometriei optimizate pentru grile de diferite dimensiuni

A fost analizată topologia potențialului din grila-suport prin trasarea perpendicularelor pe liniile echipotențiale. În acest scop a fost dezvoltat un software dedicat.

Activități:

- 593.0.0.0 Dezvoltarea unui model matematic pentru distribuția de potențial, bazat pe ecuația lui Poisson
- (i) formularea problemei, bazată pe ecuațiile de continuitate în câmp electric
 - (ii) determinarea condițiilor specifice pentru electrozii bateriilor plumb-acid
 - (iii) formularea numerică în vederea implementării (i.e. Dezvoltarea modelului de rezolvare a ec. Poisson prin metoda relaxării)
- 593.0.0.0 Dezvoltarea unui model matematic pentru analiza topologica a soluțiilor ecuațiilor Poisson
- (i) formularea unei ipoteze pentru colectare optimă în câmp
 - (ii) comparații cu datele anterioare
 - (iii) formularea matematică și numerică a soluției propuse
2. Implementarea matematică a celor două într-un software dedicat
 - (i) subrutină pentru rezolvarea ec. Poisson cu funcții la limită specifice electrodului
 - (ii) subrutină pentru analiza topologiei în câmp
 - (iii) modul de comunicare între cele două
 - (iv) module de analiză rezultate, statistică, etc
 3. Calculul distribuției de câmp pe parcursul descărcării precum și analiza topologica a acestuia, în vederea optimizării modului de colectare al curentului prin grilă
 - (i) rezultatele simulării pentru diferite poziții ale colectorului în grile de tip „landscape”
 - (ii) rezultatele simulării pentru diferite poziții ale colectorului pentru grile de tip „portrait”

Am întocmit raportul de faza sintetic și fișele CDI aferente indicatorilor de rezultat obținuți (componente ale raportului de faza *in extenso*): metoda (1), software (1).

Faza 2: Studiul concentratoarelor solare de tip reflector și refractor și a receptoarelor termice cu structură spațială de corp negru

Evaluarea stadiului actual al tehnologiei de concentrare a energiei solare, pe baza unui studiu documentar al literaturii de specialitate

Activități

1. Studiu pe baza literaturii de specialitate asupra stadiului actual al producerii de energie electrică cu energie solară concentrată de tip reflector și refractor
2. Proiect de model experimental de receptor termic cu structura 3D pentru reflexii multiple și absorbție maximă (spre 100%).

Soluția propusă de noi presupune construcția unui sistem termic hibrid cu energie solară concentrată combinată cu un arzător pe bază de biogaz. Acesta va cuprinde 4 subsansamble funcționale: concentratorul solar, motorul cu ciclul de combustie externă, structura mobilă suport mecanic care asigură și

	<p>orientarea diurnă după soare și generatorul electric. Întregul ansamblu va avea un sistem de comandă și control automat. Sistemul va avea sub 10 kW și este destinat amplasării în zone cu insolație medie.</p> <p>Prin parcurgerea unui mare număr de surse documentare, obiectivul introductiv al acestei prime faze a tematicii noastre a fost îndeplinit. Au fost elaborate schemele de principiu ale unui sistem de concentrator solar și au fost proiectate și realizate primele modele de receptor termic cu structură de corp negru 3D.</p>
<p>Faza3: Sisteme de recepție destinate captării și conversiei energiei EM din spectrul de poluare ambientală (electrosmog)</p>	<p>A fost implementată experimental o soluție de conversie a energiei câmpului de poluare EM în energie electrică.</p> <p>Activități:</p> <p>593.02.02 Proiectarea și testarea antenei de recepție</p> <p>(i) determinarea spectrului de frecvențe ambiental în zona vizată pentru recuperare ;</p> <p>(ii) proiectarea teoretică și testarea a 6 iterații experimentale (simulare-proiectare-conversie fișiere-realizare practica-echipare-masurare S11-testare) a unui tip de antenă colectoare ;</p> <p>(iii) determinarea ariei specifice de captură a energiei EM pentru antena colectoare.</p> <p>(iv) Schemă de realizare a circuitului de conversie și a antenei de recepție</p> <p>593.02.02 Proiectarea convertorului de energie și testarea unui sistem independent de conversie</p> <p>(i) Elaborarea unei metode de conversie a energiei EM în alte forme de energie;</p> <p>(ii) Realizarea unui model experimental funcțional al unui sistem de captare a câmpului de poluare EM ambientală;</p> <p>(iii) Elaborarea unei cereri de brevetare pentru antena colectoare și conversie EM în curent continuu.</p> <p>3. Am întocmit raportul de faza sintetic și fișele CDI aferente indicatorilor de rezultat obținuți (componente ale raportului de faza <i>in extenso</i>) : schemă de realizare (1) ; model experimental funcțional ; metodă (1) ; Cerere de brevetare (1).</p>
<p>Faza4: Proiect de concentrator solar cu lentile Fresnel, orientabil continuu pentru compensarea mișcării solare diurne</p>	<p>Activități: Pentru atingerea obiectivului fazei, și anume acela de a crește eficiența de captare și conversie a grupurilor energetice ce folosesc energia solară concentrată, activitățile preconizate sunt:</p> <p>1) Realizarea unui proiect complex de execuție a unui sistem concentrator solar – traductor: Ansamblul este format din lentile Fresnel pentru energie solară concentrată și panouri solare, precum și elemente de stocare a energiei pentru alimentarea motoarelor necesare mișcării ansamblului în vederea compensării mișcării solare.;</p> <p>2) Realizarea a două modele experimentale (un sistem de concentrator solar, și un sistem pentru determinarea eficienței de conversie).- Pentru determinarea eficienței de conversie solară în cazul amplasării concentratoarelor în podișul transilvan, s-a realizat un model experimental ce include :</p> <p>(i) un trepied inteligent, AZ-EQ6 GT Mount ce permite atât orientare azimutală cât și ecuatorială pentru suprafața unui panou fotovoltaic,</p> <p>(ii) sistem de prindere a panoului fotovoltaic,</p>

	<p>593.0.0 panou fotovoltaic,</p> <p>(iv) element de stocare a energiei pentru mișcarea autonomă a monturii trepiedului,</p> <p>593.0.0 consumator pentru estimarea eficienței de conversie în funcție de orientarea panoului solar.</p> <p>De asemenea, s-a achiziționat un motor Stirling împreună cu grupul generator, urmând a fi adaptat sistemului propus de concentrator solar – traductor, în următoarele etape ale proiectului.</p>
<p>Faza 5: Fabricarea și caracterizarea grilelor proiectate în faza 1</p>	<p>Au fost proiectate și fabricate în vederea testării grile optimizate conform rezultatelor din activitățile anterioare.</p> <p>Activități:</p> <p>Dezvoltarea unui model pentru grila de plumb; acesta a implicat: (i) analiza proprietăților fizice ale distribuției de câmp electric; (ii) analiza proprietăților electrochimice; (iii) analiza geometrică a structurilor care pot fi utilizate pentru proiectarea grilei (suprafețe, perimetre, maximizare / minimizare rapoarte etc)</p> <p>Dezvoltarea de metode de analiză a calitatii pentru fiecare propunere de grid – prin estimarea timpului necesar pentru colectarea sarcinii generate în funcție de distribuția de câmp electric respectiv de forma gridului</p> <p>Elaborarea unei metode de fabricare a grilelor care să înglobeze modelele teoretice și datele rezultate din simulare numerică</p> <p>Decuparea grilelor din foaie de plumb pusă la dispoziție de ROMBAT SA – pentru a asigura posibilitatea de a efectua comparații cu produsele industriale.</p>
<p>Faza 6: Captarea energiei EM ambientale prin absorbția în culturi de plante și utilizarea lor ca perdea anti-electrosmog</p>	<p>A fost proiectat și realizat un sistem experimental de conversie a energiei EM din spectrul de poluare, prin absorbția în culturi mobile de plante, crescute în mediu exterior și sau realizat teste preliminare.</p> <p>Activități:</p> <p>i. Realizarea unei instalații automatizate de picurare pentru plante, cu funcționare autonomă (cu alimentare solară).</p> <p>(i) proiectarea și dimensionarea traductorului de umiditate al solului cu efect capacitiv;</p> <p>593.0.0 realizarea prototipului și testarea variației capacității traductorului cu umiditatea, temperatura și tipul de sol;</p> <p>(ii) proiectarea schemei electronice a senzorului de umiditate și a automatului de udare;</p> <p>(iii) proiectarea circuitului imprimat (PCB) a senzorului de umiditate și a automatului de udare;</p> <p>(iv) realizarea PCB pentru 8 senzori de umiditate și automate de udare;</p> <p>(v) echiparea PCB cu componente SMD, împachetarea și testarea funcționării dispozitivelor;</p> <p>(vi) elaborarea, depanarea, testarea firmware-ului și programarea senzorilor de umiditate;</p> <p>(vii) calibrarea senzorilor de umiditate realizați pentru tipul de sol utilizat;</p> <p>(viii) teste de funcționare a 5 instalațiilor de udare în condiții reale (ploaie, temperaturi extreme) teste de laborator cu 3 senzori de umiditate;</p> <p>2. Proiectarea și realizarea perdelei anti-electrosmog</p> <p>(i) determinarea spectrului de frecvență/amplitudine ambiental în zona vizată</p>

	<p>pentru amplasament ;</p> <p>(ii) proiectarea și realizarea sistemului de susținere a plantelor (jardiniere, araci), de monitorizare a mediului ambiant (temperatura, umiditate) și de recepție a electrosmogului (antene) pentru doua perdele (referinta si iradiata);</p> <p>(iii) alegerea soiurilor de plante și testarea preliminară a rezistenței acestora (din 10 soiuri utilizate) la germinare controlată, răsădire și dezvoltare ;</p> <p>593.0.0 Am intocmit raportul de faza sintetic si fisele CDI aferente indicatorilor de rezultat obtinuti (componente ale raportului de faza <i>in extenso</i>): prototip aparat (1); Cerere de brevetare (2).</p>
--	--

Proiectul PN16-30 01 03: Inginerie Hi-Tech in cadrul participarii INCDTIM la experimentul ATLAS-LHC de la CERN Geneva

<p>Faza 1: Implementarea conceptului „mini-drawer” in dezvoltarea mecanicii pentru noua electronica „on-detector” a Tile Calorimeter</p>	<p>Activitati:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. A fost elaborata solutia tehnica privind mecanica mini-drawer, total integrata in sistemul noii electronici „on-detector” a detectorului TileCal din cadrul experimentului ATLAS. 2. A fost realizata documentatia de executie a Demonstratorului mecanicii mini-drawer, cuprinzand proiectele de executie pentru cele 3 tipuri de corpuri MD si elementele de legatura mecanice si hidraulice. 3. A fost dezvoltat un model experimental al Mecanicii Mini-Drawer, format din patru mini-drawere echipate cu un sistem de distributie a serviciilor electrice si optice si cu un sistem de transfer al caldurii disipate de componentele placilor electronice care echepeaza fiecare MD. 5. Au fost realizate o serie de teste si incercari pentru determinarea performantelor tehnico-functionale a MD. Testele primare ale Demonstratorului au fost realizate la INCDTIM ele fiind apoi urmate de teste complexe la CERN Geneva. 6. A fost realizata proiectarea si fabricarea unui Sistem de manipulare pentru instalarea modulelor „Long Barrel” (LB) a Tile Calorimeter in zona SPS H8 Test Beam de la CERN, necesara testarii modelului experimental al noii ehaviour a TileCal in ehaviour de particule. Au fost elaborate documentatiile de certificare, si utilizare a echipamentul, acesta fiind utilizat la setup-ul infrastructurii pentru cele 2 teste in ehaviour realizate in acest an.
<p>Faza 2: Model experimental al Sistemului de manipulare a unitatilor noii electronici a Tile Calorimeter</p>	<p>Activitati:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Au fost elaborate solutiile tehnice ala Sistemului de Manipulare Mini-Drawere (SMMD) avand ca baza noul concept „Mini-drawers Tooling” si in deplina concordanta cu cerintele mediului de lucru reprezentat de infrastructura incintei subterane a experimentului ATLAS. 2. A fost realizata documentatia de executie a modelului experimental al SMMD, cuprinzand proiectele de executie pentru principalele elemente: Slider, Basket si Spools. 3. A fost dezvoltat un model experimental al SMMD cuprinzand mai multe versiuni ale unitatilor functionale, fapt ce a permis alegerea variantelor optime din punct de vedere al gradului de integrare a SMMD in cadrul procedurilor de instalare a noii electronici „on-detector” a detectorului TileCal. 4. Modelul experimental al SMMD a a fost supus unor teste in vederea validarii principalelor componente. Testele au fost realizate la INCDTIM si la CERN. Testele de la CERN s-au efectuat in diferite locatii: laboratorul TileCal, Laboratorul Test Beam SPS H8 si incinta subterana a detectorului ATLAS, dar si

	<p>in diferite conditii de exploatare: diverse pozitii in ehavio ale modului Tile Calorimeter.</p> <p>5. Pentru realizarea testelor de casa a SMMD, a fost proiectat realizat un Stand de incercari. Acesta asigura reproducerea exacta a conditiilor de manipulare a mini-drawerelor pentru instalarea acestora in modulele Tile Calorimeter. Standul realizat permite testarea SSMD cu accent pe studiul alinierii elementelor acestuia fata de modulul Tile Calorimeter pe axa de inaintare a mini-drawerelor, dar si testarea Mecanicii Mini-Drawer: teste de fiabilitate a conexiunilor mecanice si a conectorilor circuitului de racire cu apa.</p> <p>6. A fost elaborat, de catre Gabriel Popeneciu in calitate de editor, capitolul 7 – Mechanics al documentului CERN <i>Initial Design Review for ATLAS Phase II Upgrade Tile Calorimeter System</i>.</p>
--	--

Proiectul PN16-30 01 04: Hidrogenul ca vector de energie – metode noi pentru stocarea si utilizarea hidrogenului in scopuri energetice

<p>Faza 1: Dezvoltarea de materiale poroase cu proprietati de stocare si transformare a H_2 si CO_2 in metan sintetic</p>	<p>Activitati:</p> <p>593.0.0 S-a elaborat o nouă metodă de preparare a materialelor de tipul MeNP/MOF, prin care s-a urmărit păstrarea integrității structurii metal-organice în urma depunerii nanoparticulelor metalice, dar și depunerea de nanoparticule cât mai mici în interiorul structurii MOF. Pentru atingerea acestor obiective am parcurs următoarele etape:</p> <ol style="list-style-type: none"> i. Am efectuat un studiu de literatură pentru a identifica metodele de preparare a materialelor de tipul MeNP/MOF dezvoltate până în prezent, dar și tipul acestora. În urma studiului am decis prepararea materialelor de tipul MeNP/MOF folosind trei căi, în scopul alegerii variantei optime de sinteză: <ul style="list-style-type: none"> • Metoda 1: Impregnarea umedă a structurii metal-organice alese ca suport cu soluția de precursor metalic vizat, urmată de reducerea la temperatură în flux de H_2. • Metoda 2: Impregnarea umedă a structurii metal-organice alese ca suport cu soluția de precursor metalic vizat, urmată de reducerea la temperatura camerei cu soluție apoasă de $NaBH_4$. • Metoda 3: Impregnarea de tipul “double solvent”, urmată de reducerea la temperatura camerei cu soluție apoasă de $NaBH_4$. ii. Am optimizat metodele 2 și 3 din punct de vedere al concentrației soluțiilor utilizate, atât pentru precursorul ehavioiu cât și pentru reducător, dar și dpdv al timpilor de lucru, al raportului solvent – material utilizat, etc. Metoda 1 a fost abandonată datorită ineficienței în păstrarea integrității MOF. iii. Am utilizat Metoda 2 și 3 pentru sinteza catalizatorilor de tipul Pt(3%)/UiO-66, Ni(10%)/UiO-66 și Ni(10%)/MIL-101, materiale noi, neraportate până acum în literatură. <p>593.0.0 S-au identificat și/sau elaborat metodele de caracterizare a materialelor de tipul MeNP/MOF din punct de vedere structural, morfologic și funcțional.</p> <ol style="list-style-type: none"> i. Am caracterizat din punct de vedere structural materialele sintetizate prin determinarea suprafeței specifice și a distribuției porilor (metoda BET) și prin difracția de raze X pe pulberi, sau prin tehnica SEM-EDX. ii. Am caracterizat din punct de vedere morfologic materialele sintetizate prin microscopia electronică de baleiaj (SEM).
--	--

	<p>iii. Am caracterizat din punct de vedere funcțional materialele sintetizate prin tehnici la temperatură programată cum ar fi desorbția H₂ (H₂-TPD) sau CO₂ (CO₂-TPD) (cei doi reactanți în reacția de metanare) pentru a stabili tipul și tăria centrilor ehaviour ehavi pentru chemisorbția acestor specii.</p> <p>593.0.0 S-au efectuat teste preliminare privind activitatea catalitică a acestor ehaviou în procesul de metanare folosind tehnica reacției la temperatură programată.</p> <p>i. Am realizat instalația pentru testarea catalizatorilor de tipul MeNP/MOF în reacția de metanare.</p> <p>ii. Am stabilit și optimizat metoda analitică pentru determinarea compoziției gazelor efluente.</p> <p>iii. Am determinat condițiile optime de reacție ținând cont de următorii parametri: raport molar al reactanților, cantitatea de catalizator utilizată pentru a asigura curgere cu deplasare a gazelor, viteza de curgere a gazelor.</p> <p>iv. Am calculat gradul de conversie a CO₂ și selectivitatea în formarea metanului pentru fiecare catalizator testat.</p> <p>4. Am întocmit raportul de fază sintetic și fisele CDI aferente indicatorilor de rezultat obținuți (componente ale raportului de fază in extenso): metode (2).</p>
<p>Faza 2: Scale-up si optimizare metoda de laborator de preparare a materialelor poroase de tip MOF cu aplicatii in stocarea hidrogenului</p>	<p>Activitati:</p> <p>593.0.0 S-a dezvoltat și optimizat o metodă verde de sinteză a structurii metal-organice MIL-101, folosind tehnica solvotermică. Metoda dezvoltată permite evitarea modulatorilor acizi (HF, HCl etc.). S-au studiat:</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ influența concentrației amestecului de reacție, ○ influența timpului de reacție, ○ influența temperaturii , ○ influența metodei de activare <p>asupra caracteristicilor texturale ale structurii metal-organice.</p> <p>2. S-au stabilit condițiile de reacție care permit sinteza MIL-101 cristalin cu suprafață specifică BET mare (cca. 3700-3800 m²/g) și volum mare de pori (cca. 1.9-2.0 cm³/g).</p> <p>3. S-a dezvoltat o metodă de activare chimică a produsului sintetizat brut, care permite prelucrarea cantităților mari de produs brut și nu modifică semnificativ caracteristicile texturale ale produsului activat. S-a folosit carbonat de sodiu, o bază slabă frecvent utilizată în industrie, care nu ridică probleme mari privind neutralizarea ei.</p> <p>4. S-a mărit scala de sinteză a MIL-101, prin metoda dezvoltată și optimizată, până la dimensiuni de 9.8 g MIL-101/șarjă.</p> <p>5. Am întocmit raportul de faza sintetic si extins, precum si fisele CDI aferente indicatorilor de rezultat obtinuti (componente ale raportului de faza in extenso).</p>
<p>Faza3: Dezvoltarea de electrozi cu activitate ridicata in electro-oxidarea compusilor organici folositi ca "rezervoare" de hidrogen (metanol, acid formic)</p>	<p>Activitati:</p> <p>593.0.0 S-au preparat și caracterizat electrozi modificali pe bază de linkerii organici și HKUST:</p> <p>i. S-au preparat electrozi modificali cu acid mercaptoacetic (MAA) prin metoda autoasamblării. Filmul de HKUST a fost crescut din soluția</p>

	<p>mamă maturată (30 zile, la 20°C);</p> <p>ii. S-au preparat electrozi modificați cu acid trimesic (TA) prin metoda electrochimică. Și în acest caz filmul de HKUST a fost crescut din soluția mamă maturată (30 zile, la 20°C);</p> <p>iii. Electrozii preparați au fost caracterizat prin difracție de raze X, prin microscopie de forță atomică și spectroscopie RAMAN.</p> <p>593.0.0 S-a testat activitatea electrocatalitică a electrozilor preparați în reacția de oxidare a metanolului în mediu acid</p> <p>Activitatea electrocatalitică a fost evaluată utilizând:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Voltametria ciclică: s-au testat electrozii: Au_disc, Au_MAA, Au_MAA_HKUST, Au_TA și Au_TA_HKUST; • Cronoamperometria: s-au testat electrozii: Au_disc și Au_MAA_HKUST; • Spectroscopia de impedanță electrochimică: s-au testa electrozii: Au_MAA, Au_MAA_HKUST și Au_TA_HKUST. <p>593.0.0 S-a testat activitatea electrocatalitică a electrozilor preparați în reacția de oxidare a acidului formic în mediu acid</p> <p>Activitatea electrocatalitică a fost evaluată utilizând:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Voltametria ciclică: s-au testat electrozii: Au_disc, Au_MAA și Au_MAA_HKUST; • Cronoamperometria: s-au testat electrozii: Au_disc și Au_MAA_HKUST; <p>4. S-a întocmit raportul de fază sintetic și fișele CDI aferente indicatorilor de rezultat obținuți</p>
--	--

Proiectul PN16-30 02 01: Tehnici de micro-si nano-fabricatie dedicate dezvoltarii de dispozitive moleculare respectiv termoelectrice si a senzorilor pe baza de grafene

<p>Faza 1: Electrozi metalici interdigitați modificați cu grafene, utilizați la detectia ionilor de metale grele (Cu²⁺; Pb²⁺)</p>	<p>Activitati:</p> <p>1. S-a optimizat, dezvoltat si implementat un procedeu simplu, rapid si necostisitor de obtinere a unui nou material nanocompozit pe baza de chitosan si grafene dopate cu atomi de azot, cu aplicabilitate in domeniul detectiei de ioni metalici din solutii apoase. Pentru aceasta s-au parcurs urmatoarele etape:</p> <p>i. S-a efectuat un studiu de literatura pentru a putea identifica metodele de sinteza folosite pana in prezent pentru obtinerea de noi materiale nanocompozite, rezultate in urma asocierii unui material pe baza de carbon cu un polimer biocompatibil;</p> <p>ii. Tinand cont de faptul ca toate materialele si procedeele de preparare a acestora, cunoscute pana in prezent, implica sinteze costisitoare si de lunga durata, s-a implementat o noua metoda de laborator pentru obtinerea unui material nanocompozit pe baza de chitosan (Ch) si grafena dopata cu atomi de azot (N-Gr);</p> <p>593.0.0 S-a optimizat procedura de sinteza din punct de vedere al raportului dintre reactanti, timpului si temperaturii de reactie, verificand totodata reproductibilitatea metodei de sinteza – comparativ cu metodele existente in literatura metoda dezvoltata este necosisitoare, simpla, rapida, are loc la temperatura camerei implicand pasi succesivi de ultrasonare si agitare magnetica;</p> <p>iv. S-au analizat caracteristicile morfologice si structurale ale noului material</p>
--	---

nanocompozit obtinut, utilizand microscopia electronica de scanare (SEM) si prin transmisie (TEM), difractia de raze X (XRD) si spectroscopia fotoelectronica in domeniul razelor X (XPS).

2. S-a implementat si optimizat metoda de laborator pentru obtinerea de electrozi interdigitati avand suprafata modificata cu noul material nanocompozit pe baza de chitosan si grafene dopate cu atomi de azot. Pentru aceasta s-au parcurs urmatoarele etape:

- i. S-a optimizat metoda de obtinere a electrozilor interdigitati modificati, din punct de vedere a cantitatii de material nanocompozit necesar;
- ii. S-a verificat reproductibilitatea procesului de obtinere a acestor electrozi modificati;
- iii. S-au efectuat experimente de echilibrare a electrozilor modificati in diferite solutii apoase, pentru a stabili conditiile optime de functionare a retelei polimerice in cadrul experimentelor de detectie si adsorbție a ionilor metalici.

3. Prin masuratori rezistive, s-a testat raspunsul electrozilor interdigitati modificati la detectia diferitelor tipuri de ioni metalici din solutii apoase. Pentru aceasta s-au parcurs urmatoarele etape:

- i. S-a dezvoltat si implementat modelul experimental folosit pentru detectia de ioni metalici din solutii apoase;
- ii. S-a testat capacitatea de detectie a electrozilor modificati fata de anumiti ioni metalici (Cu^{2+} , Pb^{2+} , Ni^{2+} si Co^{2+}) din solutii apoase;

593.2.2 S-au realizat experimente multiple (in aceleasi conditii impuse de metoda, pe aceleasi solutii, in zile diferite) in vederea confirmarii preciziei si a reproductibilitatii metodei de detectie propuse;

- iv. S-au determinat limitele de detectie, deviatia standard – SD, respectiv deviatia standard relativa – RSD %.

4. Prin masuratori de voltametrie ciclica, s-a testat raspunsul electrozilor interdigitati avand suprafata modificata, la detectia diferitelor tipuri de ioni metalici din solutii apoase. Pentru aceasta s-au parcurs urmatoarele etape:

- i. S-au ales parametrii de lucru si s-au stabilit conditiile necesare efectuării de experimente prin voltametrie ciclica;
- ii. Pe baza datelor experimentale s-au obtinut curbele de calibrare asociate si s-au calculat limitele de detectie;

593.2.2 S-au corelat datele obtinute din masuratori rezistive si de voltametrie cilcica, analizand obiectiv avantajele si dezavantajele fiecarei metode;

- v. S-a concluzionat ca electrozii interdigitati nu au selectivitate suficient de buna pentru ionii de Pb(II) ;

vi. S-a decis schimbarea electrozilor interdigitati cu electrozi de aur.

5. S-a implementat si optimizat metoda de laborator pentru obtinerea de electrozi de aur avand suprafata modificata cu noul material nanocompozit pe baza de chitosan si grafene dopate cu atomi de azot. Pentru aceasta s-au parcurs urmatoarele etape:

- i. S-a optimizat procesul de modificare a suprafetei electrozilor metalici de aur si s-a verificat reproductibilitatea acestuia;
- ii. S-a determinat aria activa a electrozilor modificati, folosind un indicator redox;

593.2.2 S-au efectuat experimente de voltametrie ciclica, pentru a

	<p>testa capacitatea de detectie a electrozilor de aur nemodificati, fata de anumiti ioni de metale grele (Cu^{2+}, Pb^{2+}, Ni^{2+} si Co^{2+}) din solutii apoase;</p> <p>593.0.0 S-au efectuat experimente de voltametrie ciclica si liniara pe electrozi de aur avand suprafata modificata cu noul material nanocompozit si s-a verificat reproductibilitatea metodei experimentale propuse, observandu-se o capacitate de detectie net superioara fata de electrozii nemodificati;</p> <p>v. S-au comparat rezultatele obtinute cu cele doua tipuri de electrozi modificati: electrozi interdigitati respectiv electrozi metalici;</p> <p>vi. Pe baza performantelor electrochimice foarte bune (domeniu liniar; limita de detectie; reproductibilitate; stabilitate) electrozii metalici modificati, au fost selectati pentru detectia selectiva a ionilor de Pb(II) din probe reale.</p> <p>6. S-a intocmit raportul de faza sintetic si fisele CDI aferente indicatorilor de rezultat obtinuti (componente ale raportului de faza in extenso): studiu (1) metoda (1), produse (3), model experimental (1), brevet (1), articol cotate ISI (1).</p>
<p>Faza 2: Fabricarea de electrozi micro/nano-structurați pentru senzori electrochimici prin litografie laser</p>	<p>Activitati:</p> <p>593.0.0 S-a dezvoltat si optimizat o metoda de fabricare de electrozi metalici micro-si nanostructurati ca baza pentru construirea de senzori electrochimici. Pentru aceasta au fost parcurse urmatoarele etape:</p> <p>i. S-a efectuat un studiu de literatura pentru a identifica modalitati tehnice de realizare, precum si sistemul chimic optim</p> <p>ii. S-a preparat substratul in vederea depunerii filmului activ pentru litografie</p> <p>iii. S-au depus filme subtiri dintr-o solutie de polimer dopat cu saruri metalice prin procedeul de spin-coating</p> <p>iv. S-a dezvoltat si optimizat procesul de litografie optica propriu-zis in filmele subtiri depuse in etapa anterioara</p> <p>v. S-a indepartat matricea polimerica din filmele subtiri si s-au caracterizat morfologic, respectiv spectroscopic structurile metalice obtinute</p> <p>vi. S-a utilizat metoda optimizata de litografie optica prin scriere directa cu laserul pentru construirea de suprafete metalice micro- si nanostructurate in forma de electrozi interdigitati.</p> <p>593.0.0 S-a dezvoltat si optimizat o metoda de obtinere de filme metalice micro-si nanostructurate prin tehnici de litografie laser. Pentru aceasta au fost parcurse urmatoarele etape:</p> <p>i. S-a efectuat un studiu de literatura pentru a identifica procedeele clasice de obtinere a filmelor metalice, precum si modalitatile de caracterizare ale acestora din punct de vedere morfologic si spectroscopic</p> <p>ii. S-a preparat substratul in vederea depunerii filmului activ pentru litografie si am optimizat sistemul chimic care contine speciile active precursorare</p> <p>iii. S-au depus filme subtiri dintr-o solutie de polimer dopat cu saruri metalice prin procedeul de spin-coating</p> <p>iv. S-au obtinut filme metalice continue prin litografie optica, respectiv prin structurare directa cu laserul dupa traiectorii bine determinate</p>

	<p>v. S-au caracterizat filmele obtinute din punct de vedere morfologic prin tehnici de microscopie optica, de scanare electronica si de forta atomica, respectiv comportamentul spectroscopic prin spectroscopie UV-Vis.</p> <p>vi. S-a utilizat metoda de obtinerea de filme metalice micro-si nanostructurate prin tehnici de litografie optica prin scriere directa cu laserul pentru optimizarea proprietatilor optice ale filmelor obtinute.</p> <p>3. S-a intocmit raportul de faza sintetic si fisele CDI aferente indicatorilor de rezultat obtinuti (componente ale raportului de faza <i>in extenso</i>): studiu (1); metode (2)</p>
<p>Faza3: Dioda hibridă organic-anorganic pe bază de compusi moleculari cu centri metalici</p>	<p>Activitati:</p> <p>593.2.2 Am optimizat si implementat o metodă modernizată de obținere a joncțiunii AlZnO/ZnO/FePc/Au și NdZnO/ZnO/FePc/Au pe substrat rigid și/sau flexibil prin tehnici de depunere epitaxială cu fascicul molecular. Pentru aceasta am parcurs urmatoarele etape:</p> <p>i. Am efectuat un studiu al literaturii pentru a putea identifica materialele si tehnicile folosite pentru fabrica diodele semiconductoare hibride organic-anorganic</p> <p>ii. Am fabricat electrozii transparenți de ZnO dopati cu Al si pământuri rare.</p> <p>iii. Pentru caracterizarea acestora am folosit tehnici de caracterizare structurală și optică.</p> <p>iv. Prin măsurători de difracție de raze X am putut determina dimensiunea medie a granulelor pentru electrozii obținuți. Din aceste măsurători rezultă o concentrație optimă de 2% pentru dopajul cu Al. La această concentrație dimensiunea cristalitelor D este maximă.</p> <p>v. Prin măsurători elipsometrice, folosind un elipsometru M2000V J.A. Woollam Elipsometer, care permite efectuarea de investigații elipsometrice atât în reflexie, cât și în transmisie prin probe, am putut determina indicele de refracție $n(\lambda)$, grosimea electrozilor obținuți precum și valoarea benzii optice (E_g).</p> <p>vi. Prin măsurători de AFM de topografie am obținut informații asupra „reliefului” suprafeței electrozilor de AlZnO dopați cu Gd, Nd și Er. Din aceste rezultate se poate observa uniformitatea suprafeței alcătuită din cristalite sferice. Valoarea rugozității variază între 3.7 nm pentru filmele dopate cu Er și 4.7 nm pentru dopajul cu Nd.</p> <p>vii. Am depus și caracterizat moleculele de FePc. Caracterizarea stratului molecular a fost efectuată prin tehnici spectroscopice.</p> <p>viii. Am fabricat dioda p-n hibridă organic-anorganic folosind joncțiuni ZnO/FePc utilizând electrozi transparenți de AlZnO dopați și nedopați pe substrat rigid și/sau flexibil</p> <p>ix. Am testat proprietățile electrice ale diodei p-n cu joncțiune hibridă</p> <p>x. Prin determinarea caracteristicii volt-amperice a diodei am obținut valoarea maximă a densității de curent la 2V de 0.15mA/cm² pentru joncțiunea construită pe substratul flexibil transparent. Dopajul electrodului transparent cu Nd scade densitatea de curent până la 0.01mA/cm².</p> <p>xi. Din măsurătorile de impedanță realizate la temperatura camerei cu un potențostat modular VSP de la firma BiLogic conectat la booster-ul extern de 5A, am putut determina valorile capacității joncțiunii p-n hibride Cs și a rezistenței serie Rs la potential DC zero.</p>

	<p>xii. Din valoarea capacității pe unitatea de suprafață am putut calcula concentrația acceptorilor din stratul organic FePc pentru cele trei diode obținute pe substraturi rigide și flexibile.</p> <p>593.0.0 Am întocmit raportul de fază sintetic și fișa CDI aferentă indicatorilor de rezultat obținuți: 1 studiu; 1 metodă</p>
<p>Faza4: Structuri supramoleculare ale unor derivați de ftalocianină adsorbiți pe suprafețe de metale nobile – caracterizare computațională</p>	<p>Activitati:</p> <p>593.0.0 S-a elucidat computațional modul de adsorbție controlată a cloro-subftalocianinelor cu bor (Sub-PC) pe suprafața de Ag(111). A fost verificată ipoteza propusă și a fost clarificat modul dinamic în care Sub-PC interacționează cu suprafața de Ag. S-au derulat următoarele activități:</p> <p>i. S-a calculat set-up-ul computațional optim de analiză a acestor sisteme prin compararea timpilor de relaxare și a energiilor de interacțiune în sistem de coordonate cartezian și cu matrice Z, cu trei algoritmi (Broyden, FIRE și Gradient Conjugat). Detaliile sunt prezentate în raportul in-extenso.</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ 45 de sisteme investigate cu timp mediu de calcul 170 ore pentru un sistem, pe 16 procesoare; s-a lucrat în paralel pe mai multe sisteme. ○ 1 lucrare științifică în curs de redactare pentru Theoretical Chemistry Accounts. <p>ii. S-a investigat adsorbția controlată a cloro-subftalocianinelor cu bor (Sub-PC) pe suprafața de Ag(111) folosind algoritmul Broyden în coordonate carteziane cu funcțională van der Waals.</p> <ul style="list-style-type: none"> ○ 15 sisteme investigate; variabilitatea mare a timpilor de calcul funcție de model a impus lucrul pe mai multe sisteme în paralel. Timp total (aproximativ) de calcul: 2 luni. ○ 1 lucrare științifică în curs de redactare pentru ACS Nano. <p>2. Am întocmit raportul de fază sintetic și fisele CDI aferente indicatorilor de rezultat obținuți (componente ale raportului de fază <i>in extenso</i>): articole cotate ISI în curs de redactare (2), participări la manifestări științifice (2), stagiu de pregătire în străinătate (1), studii(1).</p>
<p>Faza 5: Straturi ultrasubțiri de moleculelelor organice depuse prin epitaxie moleculară în vid ultraînalt (MBE) pe suprafețe metalice – caracterizare prin spectroscopie vibrațională</p>	<p>Activitati:</p> <p>593.0.0 Depunerea de filme organice ultrasubțiri prin tehnica de epitaxie cu fascicul molecular:</p> <p>v. Reconstrucția Si(111) 7 × 7 cu ajutorul unui tratament termic bine stabilit și cunoscut.</p> <p>vi. Confirmarea reconstrucției prin măsurători de tipul RHEED (Staub Instruments GmbH) și pe baza imaginilor de microscopie de scanare prin efect tunel (STM).</p> <p>vii. Purificarea în vid ultra-înalt a pulberii de FePc (Sigma-Aldrich, puritate 90%) în scopul obținerii unor filme moleculare de înaltă calitate.</p> <p>viii. Controlul grosimii filmelor subțiri organice prin utilizarea vidului ultraînalt (UHV – ultrahigh vacuum) ca și mediu de depunere a moleculelor organice.</p> <p>ix. Evaluarea influenței timpului de depunere asupra proprietăților morfologice ale filmelor de FePc.</p> <p>x. Caracterizarea STM a filmului 1 de FePc/Si(111) 7x7 pentru evidențierea omogenității acestuia și a distribuției uniforme a moleculelor.</p>

	<p>2. Efectuarea de investigații spectroscopice vibraționale pentru o înțelegere completă a structurii și a proprietăților fizico-chimice a sistemelor obținute:</p> <p>vii. Înregistrarea spectrelor Raman ale FePc sub formă de pudră.</p> <p>viii. Masurători de spectroscopie Raman amplificată de suprafață a filmelor subțiri de ftalocianine.</p> <p>ix. Determinarea grupurile funcționale implicate în legarea moleculelor de suprafață și deducerea orientării acestora față de suprafața metalică prin compararea spectrului lor Raman cu spectrul SERS al moleculelor adsorbite la suprafețele metalice.</p> <p>3. Am întocmit raportul de fază sintetic și fișele CDI aferente indicatorilor de rezultat obținuți (componente ale raportului de fază <i>in extenso</i>): studiu (1), metoda (2)</p>
<p>Faza: nr.6. Depunere de molecule prin litografie de tip Dip Pen Lithography cu aplicații în domeniul senzorilor și electronicii moleculare.</p>	<p>Activitati.</p> <p>1. S-au fabricat doua filme subtiri de Au pe suport de Si prin tehnici de epitaxie moleculara in vid inaintat. Caracterizarea topografica a suprafetelor/structurilor formate s-a facut prin tehnici STM si AFM. Pentru aceasta am parcurs urmatoarele etape:</p> <p>1.1. S-au optimizat doua protocoale de depunere diferite in vederea controlarii grosimii straturilor de Au depus. Optimizare parametri de evaporare.</p> <p>1.2. S-au obtinut doua filme subtiri de Au de grosimi diferite.</p> <p>1.3. S-au efectuat masuratori de topografie de suprafata pe cele doua filme prin tehnici STM in vid ultra inalt si respectiv AFM.</p> <p>1.4. S-a elaborat un protocol de scriere cu solutii moleculare prin tehnica Dip Pen Nanolithography.</p> <p>1.5. S-a optimizat procedeul de scriere in functie de cerneala moleculara si substrat.</p> <p>1.6. Au fost stabilite etapele operatiilor preliminare cat si a masuratorilor propriu-zise pentru fiecare sistem separat.</p> <p>1.7. S-au efectuat teste de litografie controlata a solutiei standard MHA(acid mercaptohexadecanoic) prin tehnica DPN pe suprafetele fabricate in prealabil prin epitaxie moleculara.</p> <p>1.8. Am testat filmele de Au fabricate in INCDTIM cu cerneala moleculara standard MHA.</p> <p>1.9. Am identificat geometria micro-structurilor formata pe filmul 22 cu imagini AFM. Pe filmul 24 nu am reusit sa inscriptionam.</p> <p>2. S-a fabricat cerneala moleculara cu 1,4-dithiothreitol prin incercari multiple de optimizare in functie de concentratie, solvent, vascozitate. S-au derulat urmatoarele activitati:</p> <p>2.1. S-a achizitionat produsul 1,4 dithiothreitol de la firma Sigma Aldrich. Am folosit acest compus in vederea obtinerii unui sistem de recunoastere moleculara a unor ioni metali de Cr, Mn si Co pe film de Au cu strat DTT auto-ansamblat.</p> <p>2.2. Am fabricat cerneala moleculara cu 1,4 –dithiothreitol prin procedee chimice pentru scriere direct pe suprafata .</p> <p>2.3. S-a scris cu noua cerneala moleculara pe trei substraturi diferite. Diferite structuri au fost obtinute pe suprafetele de Au.</p> <p>2.4. Imagini AFM a structurilor scrise au fost obtinute. Diferite dimensiuni,</p>

	<p>grosimi si forme au fost litografiate cu succes.</p> <p>2.5. Noua cerneala moleculara si-a dovedit compatibilitatea cu tehnica DPN si cu suprafetele de Au.</p> <p>2.6. S-a dezvoltat un protocol chimic de fabricare a SAM-urilor de 1,4-dithiothreitol.</p> <p>2.7. S-au parcurs mai multe etape in vederea functionalizarii moleculei 1,4-dithiothreitol pe suprafata. Formarea SAM-urilor a fost demonstrata de grefarea ionilor metalici.</p> <p>2.8. Teste pe suprafata nefunctionalizata au fost efectuate. Conform astptarilor, ionii metalici nu adera pe suprafata nefunctionalizata.</p> <p>3. S-a efectuat depunerea de specii ionice pe suprafata de aur (Au) prin tehnologia de nanolitografie DPN. S-au caracterizat diferite structuri molecula/suprafata prin tehnici AFM.</p> <p>3.1. Tehnica DPN a fost folosita pentru scrierea cu trei ioni metalici diferiti pe acelasi substrat de Au. O metoda noua de fabricatie a fost demonstrata.</p> <p>3.2. S-au efectuat masuratori de topografie prin AFM, demonstrandu-se grefarea ionilor pe suprafata functionalizata. Diferite structuri au fost obtinute.</p> <p>4. S-au efectuat masuratori de spectroscopie de impedanta pentru suprafetele functionalizate cu ioni metalici inscriptionati cu DPN.</p> <p>4.1. S-a efectuat analiza sistemelor in fiecare stadiu de formare prin spectroscopie de impedanta</p> <p>4.2. Diagramele Niquist a sistemelor au fost interpretate impreuna cu circuitul echivalent rezultat in fiecare sistem studiat.</p> <p>S-a intocmit raportul de faza sintetic si fisele CDI aferente indicatorilor de rezultat obtinuti (componente ale raportului de faza in extenso): studiu (1); metoda (1), materiale (2), model experimental (1), proiect propus in competitii interne (1).</p>
--	---

Proiectul PN16-30 02 02: Materiale nanostructurate cu proprietăți controlate pentru aplicații specifice în sănătate și mediu

<p>Faza 1: Studiu comparativ privind sinteza și caracterizarea de nanoparticule magnetice obținute prin metoda chimică și metoda biosintetică</p>	<p>Activitati:</p> <p>593.0.0 S-au obtinut nanoparticule magnetice (magnetita Fe_3O_4, fier zero valent Fe^0) prin metoda chimica si prin metoda biosintetica (utilizand extracte vegetale).</p> <p>In acest scop s-au avut in vedere urmatoarele aspecte:</p> <p>593.0.0 Efectuarea unui studiu de literatura in vederea identificarii conditiilor optime de sinteza a nanoparticulelor magnetice. In acest scop s-a avut in vedere utilizarea unor medii de reactie mai putin poluante (inlocuirea solventilor organici cu apa);</p> <p>ii. Selectarea unor extracte vegetale, care potrivit datelor de literatura, nu au mai fost utilizate pentru obtinerea nanomaterialelor de tipul celor propuse. Astfel, s-au preparat extracte vegetale apoase obtinute din deseuri agricole reprezentand cojile unor legume si fructe, sau frunze si alte parti neintrebuintate ale unor plante, utilizarea acestora servind unui dublu scop: folosirea unei surse ieftine, usor accesibile de constitienti chimici bioactivi si, de asemenea, prevenirea poluarii rezultate din depozitarea necorespunzatoare a acestor agro-deseuri;</p> <p>iii. Optimizarea procedeeului biosintetic de obtinere a nanoparticulelor magnetice prin varierea parametrilor de reactie, respectiv tipul de extract</p>
--	---

	<p>si concentratia acestuia, concentratia sarii/sarurilor metalice utilizate, pH-ul, temperatura si timpul de contact.</p> <p>593.0.0 Investigarea proprietatilor nanoparticulelor magnetice sintetizate prin utilizarea unor diverse tehnici experimentale: spectroscopia in ultraviolet si vizibil (UV-Vis), difractia de raze X (XRD), microscopia electronica de transmisie (TEM), microscopia electronica cu baleiaj (SEM), spectroscopia in infrarosu cu transformata Fourier (FTIR), spectroscopia de raze X cu fotoelectroni (XPS), magnetometria cu proba vibranta (VSM).</p> <p>3. Intocmirea raportului de faza sintetic si a fiselor CDI aferente indicatorilor de rezultat obtinuti (componente ale raportului de faza in extenso): studiu (1), metoda (1), comunicari stiintifice la conferinte internationale (2).</p>
<p>Faza 2: Sinteza nanostructurilor magnetice de tip oxizi de fier dopați cu pământuri rare folosind liganzi chelatici</p>	<p>Activitati:</p> <p>1. S-au optimizat metodele de sinteza a nanostructurilor magnetice de tip oxizi de fier cu miez simplu si miez multiplu cu straturi de acoperire continand diferiti agenti de chelatare: acidul etilendiaminotetraacetic (EDTA), acidul N-(fosfometil)imidodiacetic (PMDA), acidului nitrilotriacetic (NTA), acidul dietilenetriaminepentaacetic (DTPA), polivinilimidazol, polifosfat si polidopamina.</p> <p>2. Nanostructurile magnetice obtinute au fost folosite pentru reactii de complexare cu ioni ai pamanturilor rare: Eu, Er, Tb, Gd.</p> <p>3. A fost investigata corelatia dintre parametrii de sinteza si compozitia nanostructurilor magnetice dopate cu pamanturi rare prin spectroscopie XPS, FTIR, SEM-EDX. S-au determinat valorile magnetizarii de saturatie ale nanostructurilor magnetice dopate cu ioni ai pamanturilor rare.</p> <p>4. Au fost obtinute 2 produse noi:</p> <p>(i) Nanostructuri magnetice pe baza de polivinilimidazol dopat cu ioni ai pamanturilor rare Nanostructuri magnetice pe baza de polivinilimidazol au fost obtinute prin reactia de polimerizare radicalica a vinilimidazolului in prezenta nanoparticulelor magnetice stabilizate cu bis(2-metacrililoixietil)fosfat (MNP-PVIm). Ulterior aceste nanostructuri magnetice au fost dopate cu diferiti ioni ai pamanturilor rare avand urmatoarele concentratii determinate prin analiza EDX: MNP-PVIm- Gd 3.88%, MNP-PVIm- Gd- Tb 3.25 %, MNP-PVIm- Gd – Er 5.43 %, MNP-PVIm- Gd – Eu 5.14 %.</p> <p>593.0.0 Clusteri ehaviou de tip Fe₃O₄-EDTA Clusterii de tipul Fe₃O₄-EDTA au fost obtinuti prin metoda solvotermica. Magnetizarea de saturatie are valoarea 94 emu/g, iar imaginile TEM si SEM evidentiaza dimensiunea medie a clusterilor ehaviou de 170 nm.</p> <p>5. Am intocmit raportul de faza sintetic si fisele CDI aferente indicatorilor de rezultat obtinuti (componente ale raportulu i de faza <i>in extenso</i>): produse (2), cerere de brevet (1)</p>
<p>Faza3: Sinteza, caracterizarea structurală și morfologică a nanomaterialelor compozite pe bază de magnetită și TiO2 dopat cu metale 4f</p>	<p>Activitati:</p> <p>593.0.0 S-a obtinut sistemul compozit de tipul Fe₃O₄-TiO₂: Eu. Pentru aceasta am parcurs urmatoarele etape:</p> <p>i. Nanoparticulele ehaviour le-am sintetizat in doua etape: in prima etapa nanoparticulele magnetice au fost preparate prin metoda coprecipitarii, iar in etapa a doua-a precursorul materialului compozit a fost obtinut printr-un process sol-gel in prezenta ultrasunetelor.</p> <p>ii. Am optimizat reactia din punct de vedere al raportului volumic al</p>

	<p>reactivilor: TIPO: acac: EtOH: AcOH = 1.25:1:19:0.006 si al concentratiei de dopant (0÷12 % mol).</p> <p>iii. Pentru a verifica conversia precursorilor în nanoparticulele corespunzatoare și pentru a evalua caracteristicile behaviour ale probelor am realizat măsuratori de difracție de raze X.</p> <p>iv. Morfologia nanoparticulelor sintetizate am evidentiat-o prin microscopie behaviour de transmisie (TEM). De asemenea prin microscopie de înalta rezoluție (HRTEM) am pus în evidență fazele cristaline obținute.</p> <p>v. Am determinat porozitatea nanoparticulelor pe baza izotermelor de adsorbție-desorbție</p> <p>593.2.2 S-a obținut sistemul compozit de tipul Fe₃O₄-TiO₂:Gd. Pentru aceasta am parcurs următoarele etape:</p> <p>i. În scopul evidențierii gradului de diluție pe care ionii de Gd îl au în rețeaua nanoparticulelor de TiO₂ am preparat nanoparticule de TiO₂ dopate cu ioni de Gd. Am variat dopajul în intervalul 0.1%÷1% mol Gd.</p> <p>ii. Realizarea dopajului a fost evidențiată prin utilizarea difracției de raze X și a rezonanței electronice de spin.</p> <p>iii. Am utilizat microscopia behaviour de baleiaj (SEM) și de transmisie (TEM) pentru a evidenția morfologia nanoparticulelor sintetizate.</p> <p>iv. Au fost sintetizate nanocompozite de tipul Fe₃O₄-TiO₂:Gd, raportul molar Fe₃O₄:TiO₂ fiind de 1:12.5, iar procentul atomic al Gd variind între 0.1÷1%.</p> <p>v. Am identificat fazele cristaline formate prin utilizarea difracției de raze X</p> <p>3. Am întocmit raportul de fază sintetic și fisele CDI aferente indicatorilor de rezultat obținuți (componente ale raportului de fază <i>in extenso</i>): studiu (1).</p>
<p>Faza4: Caracterizarea fizico-chimică a nanostructurilor magnetice de tip ferite dopate cu pământuri rare pe bază de liganzi chelatici</p>	<p>Activitati:</p> <p>593.2.2 Am efectuat caracterizarea nanostructurilor magnetice dopate cu pământuri rare utilizând tehnici complexe: microscopie electronică (TEM, HRTEM, SEM-EDX), spectroscopie fotoelectronică cu raze X (XPS), spectroscopie de electroni de energie joasă (EELS), spectroscopie IR cu transformată Fourier (FTIR), spectroscopie de fluorescență, măsurători magnetice (VSM).</p> <ul style="list-style-type: none"> - A fost evidențiată morfologia nanostructurilor magnetice dopate cu pământuri rare. - Din analiza spectrelor XPS s-au determinat concentrațiile atomice ale elementelor în probele obținute și s-a demonstrat acoperirea nanostructurilor magnetice cu diferiți agenți chelatici și complexarea cu ionii pământurilor rare. - S-a efectuat studiul behaviour al nanostructurilor magnetice dopate cu ioni ai pământurilor rare. S-a evidențiat o afinitate crescută a elementului Eu pentru agentul chelatic EDTA, concentrația acestuia determinată atât din măsurători de fluorescență cât și XPS arată valori mai mari în probele care au fost funcționalizate cu EDTA. - S-au determinat proprietățile magnetice ale nanostructurilor magnetice dopate cu ioni ai pământurilor rare. S-a evidențiat că natura agentului de chelatizare influențează valorile magnetizării nanostructurilor dopate cu ioni ai pământurilor rare.

	<p>In cazul probelor de tip nanostructuri magnetice MNP-EDTA dopate cu pământuri rare Ms are valori în intervalul 67.7 – 68.3emu/g, mai mari decât în cazul probelor funcționalizate cu polimer PVIm.</p> <p>2. Au fost efectuate teste preliminare de citotoxicitate pentru evaluarea potențialului aplicativ al nanostructurilor magnetice obținute pentru diagnosticare și terapie - în colaborare cu Universitatea de Medicină și Farmacie Iuliu Hațieganu, Cluj-Napoca.</p> <p>3. Am întocmit raportul de fază sintetic și fișa CDI aferenta indicatorilor de rezultat obținuți: studiu (1)</p>
--	--

Proiectul PN16-30 02 03: Cercetări de frontieră dedicate dezvoltării de tehnologii moleculare

<p>Faza 1: <i>Investigarea prin tehnici foto-termice de contact și non-contact a parametrilor termici și electrici ai unor termoelectrici solizi, în vederea creșterii performanțelor acestora</i></p>	<p>Activitati:</p> <ol style="list-style-type: none"> Elaborarea modelului teoretic de măsurare a difuzivității termice a termoelectricilor solizi prin termografia IR; <ul style="list-style-type: none"> i) am elaborat modelul teoretic pentru masurarea difuzivitatii termice (in-plane) a solidelor, prin termografie IR. Măsurarea difuzivității termice a termoelectricilor pe bază de TiS_3/polimeri prin metoda propusă; validarea rezultatelor obținute prin radiometria IR; <ul style="list-style-type: none"> i) A fost masurata difuzivitatea termica a doi termoelectrici (TiS_3 și $Bi_2Te_{2.4}Se_{0.6}$) prin metoda propusă. Măsurarea coeficientului Seebeck al unui termoelement (TiS_3) prin metoda termografică <ul style="list-style-type: none"> i) a fost pregatit materialul in vederea analizei termografice (pulverizare strat aur prin sputtering, depunere de contacte, innegrire suprafata) ii) a fost selectata puterea optima a laserului (intre 150mW si 400mW) pentru a avea un bun raport semnal zgomot iii) A fost obtinuta o valoare a coeficientulu Seebeck $S=-554\mu V/K$, in concordanta cu valorile din literatura si tensiunea generata in functie de diferenta de temperatura dintre cele doua contacte Elaborarea modelului teoretic de caracterizare termică a termoelectricilor prin tehnici de contact (PTE, PPE) și de caracterizare termica a solidelor și lichidelor prin utilizarea. Termoelectricilor ca și detectori de radiație (tehnică PTE) <ul style="list-style-type: none"> i) A fost elaborat modelul PTE in configuratia front care permite masurarea efuzivitatii backing-ului (din faza) sau a parametrilor termici ai TE daca se cunosc parametrii termici ai fluidului de cuplare si ai backing-ului ii) A fost elaborat modelul PTE in configuratie back care permite masurarea difuzivitatii termice a backing-ului (din faza) si a efuzivitatii termice (din amplitudine) Aplicarea tehnicii PTE pentru măsurarea proprietăților termice ale unor solide prin tehnica PTE. <ul style="list-style-type: none"> i) S-a masurat difuzivitatea termica a diferitor backing-uri (alama, aluminiu, $LiTaO_3$) in configuratia back si efuzivitatea termica in configuratia front (aluminu, sticla, teflon, polypropilene).
<p>Faza 2: <i>Procese de relaxare moleculară caracteristice unor nucleozide și nucleotide: posibile mecanisme pentru controlul funcțiilor biologice ale acizilor nucleici</i></p>	<p>Activitati:</p> <ol style="list-style-type: none"> Am stabilit corelațiile spectre-structură în spectrele Raman clasice caracteristice unui numar de 12 constituenți liberi purinici (adenozina, hidrat de guanozina, 5' – adenzin – monofosfat disodic, 2'- dezoxiadenozin – 5' – monofosfat, 2' – dezoxiguanozin – 5' – monofosfat) și, respectiv pirimidinici (citidina, timidina, uridina, citidin – 5' – monofosfat, 2' – dezoxicitidin – 5' – monofosfat, hidrat de timidin – 5' – monofosfat disodic, uridin – 5' – monofosfat disodic) ai acizilor nucleici (ADN și ARN);

	<p>2. Am determinat parametrii dinamici asociati profilelor vibrationale Raman caracteristice gruparilor functionale ale celor 12 compusi studiatii;</p> <p>3. Am efectuat un studiu sistematic privind dinamica de ordinul (sub)picosecundelor a gruparilor functionale caracteristice unor nucleozide și nucleotide ale acizilor nucleici prin spectroscopie Raman clasică;</p> <p>4. Am redactat 2 articole stiintifice, trimise la publicare in reviste cotate ISI;</p> <p>5. Am prezentat o comunicare stiintifica la o conferinta internationala in domeniu; Am intocmit raportul de faza sintetic si fisa CDI aferenta indicatorului de rezultat obtinut (studiu), care include componente ale raportului de faza in extenso.</p>
<p>Faza 3: Polifarmacoterapia investigată prin tehnici moderne de relaxometrie și difuzometrie RMN</p>	<p>Activitati:</p> <p>1. Determinarea vitezelor de relaxare longitudinala selectiva a protonilor ligandului 1 si HSA, in vederea determinarii constantei de asociere si a numarului pozitiilor de legare;</p> <p>2. Determinarea vitezelor de relaxare longitudinala selectiva a protonilor ligandului 2 si HSA, in vederea determinarii constantei de asociere si a numarului pozitiilor de legare;</p> <p>In cadrul acestor 2 activitati, am investigat mecanismul de interactiune dintre biomolecule si macromolecule prin tehnici spectroscopice. Pe baza datelor experimentale am determinat parametrii fizico-chimici ce caracterizeaza interactiunea nevalenta dintre bioliganzi si macromolecule, precum numarul pozitiilor de legare si a constantei de asociere.</p> <p>Masuratorile care au fost efectuate au implicat prepararea in solutie buffer cu pH controlat, a unor seturi de probe cu concentratia molară bine definita. Cu seturile de probe preparate, au fost determinate vitezele de relaxare longitudinala selectiva a protonilor ligandului 1 respectiv ale ligandului 2, in prezenta unei concentratii constante de HSA, functie de concentratia acestuia. Aceste viteze de relaxare longitudinala selectiva, au fost determinate prin masurarea timpilor de relaxare selectiva (T_1). In acest scop, am folosit o noua secventa de puls – implementata pe platforma TopSpin 2.0 de pe spectrometrul RMN Bruker Avance III 500, pentru masurarea timpilor de relaxare (T_1), iradiind pe rand cate un singur semnal- selectiv, pentru fiecare concentratie;</p> <p>593.0.0 Determinarea constantei de asociere in cazul legarii competitive a ligandului 1 si a ligandului 2 de HSA;</p> <p>Pe baza determinarii vitezelor de relaxare, s-au calculat constantele de asociere si numarul pozitiilor de legare dintre compusi farmacologic activi si albumina serica, obtinute prin metode RMN, utilizand un model teoretic de complexare, datele experimentale fiind fitate prin intermediul unei regresii exponentiale ale componentelor magnetizarii longitudinale.</p> <p>593.0.0 Determinarea prin RMN a coeficientului de difuzie a ligandului 1 respectiv ligandului 2 in stare libera, respectiv legati de HSA.</p> <p>Pentru determinarea prin RMN a coeficientilor de difuzie pentru ligandul 1 respectiv pentru ligandul 2 in stare libera, respectiv legati de HSA, s-au preparat 4 probe distincte.</p> <p>Masuratorile de difuzie s-au efectuat folosind o secventa de puls bazata pe ecoul stimulat, in urma carora s-a putut determina coeficientul de difuzie D.</p> <p>Am intocmit raportul de faza sintetic si fisa CDI aferenta indicatorilor de rezultat obtinuti (componenta a raportului de faza in extenso): studiu.</p>
<p>Faza 4: Explorarea potențialului adjuvant al unor fitocompuși din genul <i>Plantago</i> în medicația bolilor degenerative prin interacție cu biosisteme expuse unor</p>	<p>Activitati:</p> <p>593.0.0 Din cinci specii autohtone aparținând genului <i>Plantago</i> (<i>P. Sempervirens</i>, <i>P. Lanceolata</i>, <i>P. Media</i>, <i>P. Cornuti</i> și <i>P. Major</i>) am identificat și selectat extractul hidoalcoolic de fitocompuși cu profilul</p>

<p><i>metaboliti toxici ai ciclofosfamidei</i></p>	<p>flavonoidic și antioxidant cel mai puternic. In acest scop am parcurs următoarele etape:</p> <ol style="list-style-type: none"> i. Am determinat conținutul în compuși polifenolici a extractelor hidroalcoolice de <i>Plantago</i> pe baza analizei fitochimice prin cromatografie de înaltă performanță (HPLC) cuplată cu spectrometria de masă (MS); ii. Am analizat interacția unor fitocompuși (luteolin, rutin) cu ciclofosfamida, prin metode spectrometrice (RMN, fluorescență); iii. Am determinat activitatea antioxidantă și prooxidantă a extractelor de <i>Plantago</i> prin: <ol style="list-style-type: none"> a. monitorizarea capacității de neutralizare a radicalilor liberi (DPPH, TEAC) generați în patologia bolilor degenerative și cuantificarea activității antioxidante (FC) prin metode spectroscopice de analiză biochimică. b. monitorizarea prin rezonanță electromagnetică de spin (RES) a reactivității antioxidante prin profilul radicalilor semiquinonici generați printr-un tratament alcalin al extractelor. iv. Am determinat spectrofotometric activitatea prooxidantă printr-o metodă care implică radicali liberi generați de lactază și oxidarea hemoglobinei; v. Pe baza profilului antioxidant obținut, am selectat extractul de <i>P. Sempervirens</i> în vederea continuării testelor <i>in vivo</i>; <p>593.2.2 Am evaluat <i>in vivo</i> activitatea antioxidantă și efectele anti-inflamatoare ale extractului de <i>P. Sempervirens</i>. Au fost parcurse următoarele etape:</p> <ol style="list-style-type: none"> i. Am determinat stresul oxidativ și nitro-oxidativ din ser in absența și în prezența de compus fitochimic, prin monitorizarea parametrilor specifici: malonaldehida (MDA), stres oxidativ total (TOS), capacitatea antioxidantă totală (CAT), indice de stres oxidativ (OSI), catalaza (CAT), monoxid de azot (NO), grupări tiolice (SH); ii. Am făcut o evaluare statistică a markerilor inflamației determinați prin citometrie în flux și kit-uri standard: leucocitele totale (WBC), celulele polimorfonucleare (PMN), proteina C reactivă (CRP), albumina (ALB) și proteinele totale (TP) <p>593.2.2 Am evaluat <i>in vivo</i> potențialul adjuvant al extractului de <i>P. Sempervirens</i> pe fondul unui tratament chimioterapeutic cu ciclofosamidă. In acest scop:</p> <ol style="list-style-type: none"> i. Am determinat parametrii stresului oxidativ și nitro-oxidativ din probe de ser și din țesutul ovarian; ii. Am determinat concentrația hormonilor sexuali feminini din ser; iii. Am evaluat tabloul biochimic sanguin în urma tratamentului cu ciclofosamidă; iv. Am efectuat monitorizarea evoluției ciclului estral prin analiza citologică zilnică în timpul tratamentului; <p>4. Am intocmit raportul de faza sintetic si fisele CDI aferente indicatorilor de rezultat obtinuti (componente ale raportului de faza in extenso).</p>
<p>Faza 5: Creșterea bio-disponibilității substanțelor farmaceutic active prin formarea de complecși supramoleculari cu dendrimeri</p>	<p>Activitati:</p> <p>593.2.2 Am optimizat și implementat o metodă de laborator pentru încapsularea Acidului nalidixic (Nal) în dendrimeri de tip PAMAM. Pentru aceasta am parcurs următoarele etape:</p> <ol style="list-style-type: none"> i. Am efectuat un studiu de literatura pentru a putea identifica dendrimerii folosiți ca molecule gazdă și metoda optimă de preparare a complecșilor supramoleculari: am ales structurile dendritice de tipul PAMAM, comerciali, de generație G4 și G5 cu grupări periferice de tip amino (PAMAM-NH2-G4 și PAMAM-NH2-G5), respectiv amidoetanol (PAMAM-OH-G4 și PAMAM-OH-G5) și liofilizarea ca metodă de obținere a sistemelor supramoleculare propuse; ii. Am preparat amestecuri Acid nalidixic – Dendrimeri PAMAM, utilizând diverși solvenți (DMSO, metanol, apă); iii. Am optimizat metoda de preparare prin alegerea raportului molar

	<p>Nal:PAMAM și a solventului;</p> <p>593.2.2 Am evidențiat și caracterizat fizico-chimic complexii supramoleculari preparați prin: difracție de raze X pe pulberi, 1H RMN pe lichide, spectroscopie FT-IR și UV-VI și analiză termică. Pentru aceasta am parcurs următoarele etape:</p> <ol style="list-style-type: none"> i. Am analizat materialele obținute sub formă de pulbere sau film lipicios prin difracție de raze X și calorimetrie DSC; ii. Am determinat natura interacțiunilor dintre Nal și PAMAM-NH2-G5 prin spectroscopie FT-IR și 1H RMN pe lichide; iii. Am determinat atomii implicați în interacțiunea ce are loc între Nal și PAMAM-NH2-G5 prin analiza spectrului 2D 1H-1H ROESY; iv. Am determinat stoechiometria complexului supramolecular format, prin metoda variației continue, pe baza datelor obținute prin spectroscopie 1H RMN pe lichide; <p>593.2.2 Am urmărit eliberarea in-vitro a substanței farmaceutic active din complexul supramolecular investigat prin spectroscopie UV-VIS</p> <ol style="list-style-type: none"> i. Am urmărit eliberarea in-vitro a substanței farmaceutic active Acid Nalidixic din complexul supramolecular format cu dendrimerul PAMAM-NH2-G5 prin spectroscopie UV-VIS utilizând metoda dializei; ii. Am determinat procentul de substanță activă eliberată în timp de 6 ore. <p>4. Am întocmit raportul de fază sintetic și fisele CDI aferente indicatorilor de rezultat obținuți (componente ale raportului de fază in extenso): un studiu (Studiu privind obținerea de complecși supramoleculari pe bază de dendrimeri în vederea creșterii bio-disponibilității substanțelor farmaceutic active) și un produs (Complex supramolecular PAMAM-NH2-G5-Nal)</p>
<p>Faza 6: Determinarea structurii nivelelor energetice excitate în vederea elucidării mecanismului numit spin „crossover” și dezvoltarea de materiale noi cu volum molecular controlabil prin radiație laser</p>	<p>Activitati:</p> <p>593.2.2 Am realizat un studiu teoretic pentru designul unor compuși pe bază de ioni Ni^{2+} coordonate cu liganzi organici având proprietăți de spin „crossover” controlabil prin radiație laser. Pentru aceasta am parcurs următoarele etape:</p> <ol style="list-style-type: none"> i. am efectuat un studiu de literatură pentru a putea identifica posibilele fragmente moleculare care au proprietăți de absorbție în domeniul spectral 200 – 500 nm; ii. pe baza acestor informații am identificat, respectiv am construit un număr de 20 de macrocicluri ca posibili liganzi având proprietăți de tip <i>spin crossover</i>; iii. utilizând metoda DFT, am determinat structura geometrică de echilibru pentru cei 20 de structuri supramoleculare atât pentru configurația de spin singlet cât și triplet; iv. utilizând metoda TDDFT, am generat spectrele de absorbție UV-VIS pentru fiecare structură supramoleculară în parte; v. pe baza rezultatelor obținute am identificat un număr de 5 structuri care au o eficiență bună a absorbției radiației laser în domeniul spectral dorit; vi. pentru cele 5 structuri selectate am determinat structura nivelelor electronice de excitare cât și posibilele canalele de relaxare ale stărilor excitate; vii. am determinat factorul de creștere volumică datorată tranziției de spin din starea triplet în cea de singlet; viii. pe baza proprietăților moleculare obținute prin studiul teoretic am inițiat studii experimentale referitor la sinteza chimică a structurii supramoleculare pe bază de ioni Ni^{2+} cu coordonare octaedrică; <p>2. Am întocmit raportul de fază sintetic și fișele CDI aferente indicatorilor de rezultat obținuți (componente ale raportului de fază in extenso): studiu (1)</p>

Proiectul PN16-30 02 04: Dezvoltarea unor metode alternative pentru depoluarea apei si solului

<p>Faza 1: Materiale poroase cu structură controlată având potențial aplicativ în procese de depoluare a apelor – sinteză și caracterizare</p>	<p>Activitati:</p> <ol style="list-style-type: none">1. S-a facut un studiu de literatura si s-au identificat 3 compusi de tipul Metal-Organic-Framework (MOF) – HKUST-1, MIL-101 si UiO-66 - care au proprietatile necesare unor materiale folosite in depoluarea apelor, si anume: stabilitate in aer si umezeala, proprietati mecanice bune care sa permita folosirea lor repetata, aria suprafetei mare, dimensiunea porilor foarte uniforma.2. S-au preparat si caracterizat aceste trei materiale. Pentru aceasta:<ul style="list-style-type: none">- s-a dezvoltat in cadrul sintezei o noua metoda de activare mai eficienta decat cele folosite pana acum in literatura si care utilizeaza solventi neagresivi pentru mediul inconjurator.- s-a testat si stabilit reproductibilitatea metodelor de preparare alese; se pot astfel prepara compusi cu proprietati reproductibile, cu randamente de sinteza ridicate, de cate ori va fi nevoie in cadrul fazelor viitoare ale proiectului;- s-au stabilit metodele de caracterizare relevante scopurilor prezentului proiect pentru determinarea proprietatilor importante din punct de vedere al adsorbției selective a poluatilor: aria suprafetei, forma si dimensiunea porilor, gradul de cristalinitate.3. S-au ales materialele carbonice ce vor fi preparate tinand cont de o idee noua adusa de prezentul proiect si anume folosirea unor materiale cu polaritate si hidrofilitate diferita ale suprafetei in scopul dezvoltarii unor metode de depoluare tintite pe anumite molecule4. S-au preparat si caracterizat trei materiale carbonice: carbonul nanoporos (OMC) – nepolar, oxidul de grafena (GrO) – polar si s-a preparat un material nou cu polaritate intermediara si anume oxidul de grafena partial redus (PRGrO). Pentru acesta s-a optimizat metoda la 1,5 g/sarja.<ul style="list-style-type: none">- s-au stabilit metodele de caracterizare relevante pentru aceste materiale care sunt difractia de raze X, analiza termogravimetrica si spectroscopia Raman. S-a dovedit astfel reducerea partiala selectiva a gruparilor oxigenate de pe suprafata GrO.5. S-a intocmit raportul de fază sintetic și fisele CDI aferente indicatorilor de rezultat obținuți (componente ale raportului de fază in extenso): metode (1) si studiu (1).
<p>Faza 2: Dezvoltarea și optimizarea metodelor de izolare și cuantificare a inhibitorilor de ardere din ape. Stabilirea parametrilor de performanță ai metodelor realizate</p>	<p>Activitati:</p> <p>593.0.0 S-a optimizat si dezvoltat, la nivel de laborator, o metoda de extractie pentru izolarea inhibitorilor de ardere din probe apoase. Etapele parcurse au fost urmatoarele :</p> <ol style="list-style-type: none">i. Studiu de literatura legat de surse de poluare, impact asupra mediului si sanatatii umane.ii. Am preparat probe de apa cu concentratie cunoscuta de compusi. Pentru etapa de extractie s-au testat diferite tipuri de cartuse si diferiti solventi. <p>593.0.0 S-au analizat utilizand sistemul cuplat GC/MS, extractele obtinute in etapa anterioara.</p> <ol style="list-style-type: none">i. Alegerea coloanei si a programului de temperatura, capabil sa ofere o separare optima a compusilor utilizati.ii. Pentru a stabili eficienta fiecarui tip de cartus combinat cu fiecare solvent folosit s-a calculat eficienta de extractie.

	<p>593.2.2 Validarea metodei prin stabilirea parametrilor de performanta si estimarea incertitudinii de masurare</p> <ul style="list-style-type: none"> i. S-au calculat principalii parametri de performanta ai metodei (liniaritatea, repetabilitatea, reproductibilitatea, limita de detectie, limita de cuantificare). ii. S-a estimat incertitudinea de masurarea, adica s-au luat in calcul erorile care apar pe parcursul prelucrării si analizei unei probe reale. <p>4. S-a intocmit raport de faza sintetic si fise CDI aferente indicatorilor de rezultat obtinuti : metoda (1), articol ISI (1) si conferinta (1).</p>
<p>Faza3: Îndepărtarea contaminanților organici din apă prin adsorbția lor pe materiale cu porozitate controlată</p>	<p>Activitati:</p> <ul style="list-style-type: none"> 1. Au fost testate 3 materiale de tip MOF (UiO-66, MIL-101 și HKUST-1) și 2 materiale carbonice (PRGrO și GO) pentru a evalua eficiența acestora în eliminarea poluanților organici din ape. <ul style="list-style-type: none"> i. Au fost stabilite clasele de compuși organici (Bisphenol A și Carbamazepina) care pot fi adsorbiți pe aceste tipuri de materiale. ii. A fost optimizată metoda HPLC pentru determinarea celor 2 poluanți organici din probe de apă. <ul style="list-style-type: none"> 593.2.2 Au fost investigați diferiți parametri de adsorbție, cum ar fi timpul de contact și concentrația inițială a BPA și CBZ. iv. Au fost determinați parametrii optimi de adsorbție. Dintre MOF-uri, MIL-101 poate adsorbi o cantitate mare de BPA într-un timp foarte scurt (<30 min) însă pentru CBZ este nespecific adsorbindu-l doar într-o proporție de aproximativ 20%. UiO-66, adsoarbe lent ajungând la o adsorbție maximă de peste 80% pentru BPA și peste 60% pentru CBZ, în cazul dublării cantității de adsorbant (2mg/mL). PRGrO a prezentat un potențial de adsorbție foarte ridicat pentru ambii compuși, eficiența de eliminare fiind mai mare de 55% în 30 min, aceasta crescând apoi până la peste 90% după intervalul de 6 ore. După 18 ore BPA este eliminat în întregime, iar CBZ în proporție de peste 95%. Odată cu creșterea concentrației inițiale de poluant rata de eliminare a acestuia prezintă un trend descendent mai accentuat pentru CBZ. v. Au fost realizate izotermele de adsorbție folosind modelele Langmuir și Freundlich pentru a evalua capacitatea maxima de adsorbție a PRGrO și GO. Conform modelului Langmuir capacitatea maximă de adsorbție a oxidului de grafenă parțial redus pentru ambii poluanți a fost mai mare comparativ cu cea a oxidului de grafenă. Prin urmare, PRGrO este un adsorbant promițător pentru a fi utilizat în decontaminarea apelor poluate cu acești compuși. <p>2. A fost întocmit raportul de fază sintetic și fișele CDI aferente indicatorilor de rezultat obținuți (1 studiu).</p>
<p>Faza4: Cuantificarea adsorbției metalelor toxice din ape folosind materiale de tip MOF (materiale metal-organice) și OMC (cărbune mezoporos)</p>	<p>Activitati:</p> <p>593.2.2 Studiu privind investigarea posibilitatii de utilizare a unor ehaviou nanostructurate, preparate ca adsorbanti în vederea îndepărtării urmelor de metale din soluții apoase</p> <p>Au fost testate patru materiale preparate in INCDTIM: HKUST-1, UiO-66, oxid de grafenă, oxid de grafenă parțial redus.</p> <p>S-au derulat urmatoarele activitati:</p> <ul style="list-style-type: none"> i) În vederea evaluării potențialului adsorbiv al materialelor studiate, au fost efectuate experimente de laborator, în condiții statice, în sisteme apoase sintetice conținând ioni metalici.

	<p>ii) În vederea evaluării adsorbției de metale, prin utilizarea materialelor folosite, s-a urmărit: concentrația elementului adsorbit (q) și gradul de reținere (R%)</p> <p>iii.) S-a studiat influența celor mai importanți parametri experimentali: doza de sorbent; concentrația inițială a ionului eșantion; timpul de contact dintre cele două faze.</p> <p>iv). S-a determinat conținutul contaminanților elementari prin tehnica spectrometrie de masă cu plasmă cuplată eșantion (ICP-MS)</p> <p>593.0.0.0 Plecând de la rezultatele experimentale, s-au putut stabili condițiile pentru atingerea stării de echilibru a procesului de adsorbție a anumitor ioni metalici.</p> <p>Rezultatele experimentale obținute în urma unor astfel de studii oferă o imagine completă asupra procesului de adsorbție și permite stabilirea condițiilor optime pentru care eficiența procesului de adsorbție este maximă.</p> <p>2.S-a întocmit raportul de fază sintetic și fișele CDI aferente indicatorilor de rezultat obținuți: participare conferința internațională(1), fișa de studiu (1)</p>
<p>Faza 5. Aplicarea metodelor de fitoextracție și fitostabilizare a solurilor contaminate cu metale grele</p>	<p>1. S-a cuantificat capacitatea de acumulare și de extracție a unor specii de plante crescute în soluri având concentrații diferite de metale grele în vederea tratării solurilor contaminate cu metale. Pentru aceasta s-a parcurs următoarele etape:</p> <p>a.S-a monitorizat creșterea și dezvoltarea unor specii de plante(tutunul – <i>Nicotiana Tabacum</i> și fasolea – <i>Phaseolus Vulgaris</i>), irigate utilizând 3 tipuri de apă, având concentrații diferite de metale</p> <p>b.S-a caracterizat din punct de vedere a concentrațiilor de metale părțile componente ale plantelor de tutun (radacina, tulpina inferioară/tulpina superioară, frunza și nervura) și fasole (radacina, tulpina inferioară/tulpina superioară, frunza și pastaie)</p> <p>c.S-a evaluat capacitatea de adsorbție a metalelor grele (Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, As, Cd și Pb) a plantelor studiate, prin intermediul factorului de concentrare (CF)</p> <p>d.S-a evidențiat comportamentul metalelor grele (Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, As, Cd și Pb) adsorbite de către părțile comestibile ale plantelor, prin intermediul factorului de translocare (TF), care indică eficiența plantei de a transloca metale din partea necomestibilă (radacina) în părțile comestibile ale plantelor (tulpina, frunza sau pastaie)</p> <p>e.S-a aplicat testul „two way ANOVA” factorilor de concentrare și translocare (cazul plantei de tutun și fasole) pentru a urmări variații semnificative influențate de: apă de irigare, componenta plantei, interacțiunea dintre apă de irigare și componenta asupra</p> <p>e.S-a cuantificat capacitatea unor specii de plante (toporas – <i>Viola Odorata</i> și primula – <i>Primula Vulgaris</i>) de acumulare a unor metale grele în diferite părți ale plantei (floare și frunza)</p> <p>2. S-a întocmit raportul de fază sintetic și fișa CDI aferentă indicatorilor de rezultat obținuți (componenta al raportului de fază în extenso): studiu (1).</p>

Proiectul PN16-30 02 05: Nanomateriale avansate pentru producerea și stocarea de energie

<p>Faza 1: Obținerea și investigarea electrozilor pe bază de sticle și vitroceramici cu aplicații în bateriile cu Pb</p>	<p>Activități:</p> <p>593.0.0.0 Obținerea sticlelor și vitroceramicilor având compoziția $x\text{MoO}_3(100-x)[4\text{PbO}_2\cdot\text{Pb}]$ unde $x = 5 - 50\%$ mol MoO_3, prin metoda subrăcirii topiturii. Fluxul tehnologic de obținere ale acestor</p>
---	--

	<p>vitroceramici este următorul:</p> <ul style="list-style-type: none"> - realizarea amestecului de pornire in proporții stoechiometrice pe baza de oxidul (MoO₃, PbO₂ și Pb metalic), conform compoziției xMoO₃(100-x)[4PbO₂·Pb], unde x = 5-50%; - mojararea oxidilor pana la omogenizarea acestora într-o moară cu bile; - tratamentul termic pentru realizarea topurii in cuptor electric a unui amestec omogen cu compoziția xMoO₃(100-x)[4PbO₂·Pb], unde x = 5-50%, la temperatura de 900⁰C, timp de 10 min; - răcirea bruscă a topiturii, pe o placă de oțel inoxidabil. <p>2. Investigarea structurii globale și morfologice a sistemului xMoO₃(100-x)[4PbO₂·Pb],utilizând diferite metode spectroscopice: difracție de raze X (XRD), spectroscopie infra rosu cu transformată Fourier (FTIR), Raman, UV-VIS, Fotoluminescență, spectroscopia de fotoelectroni cu excitare în domeniul razelor X, microscopia electronică de baleiaj (SEM), analiza chimică elementală prin EDX.</p> <p>3. Am întocmit raportul de fază sintetic și fisele CDI aferente indicatorilor de rezultate obținute (componente ale raportului de faza <i>in extenso</i>): studiu științific (1), participări la conferințe internaționale (3), articol cotate ISI (1)</p>
<p>Faza 2: Obținerea si caracterizarea morfologica, structurala si compoziționala a compozitelor utilizate ca anod in bateriile de Li-ion pe baza de oxizi ai unor metale tranziționale: SnO2/Fe3O4, SnO2/TiO2</p>	<p>Activitati:</p> <p>1. Am realizat și dezvoltat o nouă metodă de obținere a nanocompozitelor core-shell de tipul Fe₃O₄@SnO₂ , SnO₂@TiO₂ cu potențial aplicativ în anozii pentru bateriile Li-ion . In acest sens s-au parcurs următoarele etape:</p> <p>(i). Am studiat literatura de specialitate din domeniu pentru a evidenția metodele de obținere a nanocompozitelor de tipul Fe₃O₄/SnO₂, SnO₂/TiO₂. Conform informațiilor din literatura științifică cele mai utilizate metode de obținere a acestor nanocompozite sunt: metoda hidrotermală si solvotermală, sol-gel , metoda chimică din vapori, etc. De regulă, aceste metode de preparare necesită aparatură sofisticată, temperaturi si presiuni de lucru ridicate. Nanocompozitele Fe₃O₄/SnO₂ s-au preparat prin metoda “însămânțării” stratului de SnO₂ pe nanoparticulele de magnetită formate in prealabil. Avantajul metodei constă în faptul că, prin acest precedeu se evita precipitarea spontană a SnO₂ in solutie (precipitare omogenă), favorizând precipitarea heterogenă pe suprafața magnetitei .Nanocompozitele SnO₂/TiO₂ s-au realizat prin metoda însămânțării a stratului de TiO₂ pe nanoparticulele de SnO₂ formate în prealabil prin metoda precipitarii. Stratul de TiO₂ s-a realizat prin metoda sol-gel.</p> <p>(ii). Am variat parametrii experimentali (raportul molar și compozitia reactanților) pentru a studia influența condițiilor de preparare asupra proprietăților nanocopozitelor de tipul: Fe₃O₄/SnO₂, SnO₂/TiO₂. Am preparat 7 probe Fe₃O₄/SnO₂ și 4 probe SnO₂/TiO₂.</p> <p>2. Am caracterizat nanocompozitele obținute din punct de vedere structural, morfologic și compozițional.</p> <p>(i) Am efectuat analiza structurală prin Difracție de Raze X (XRD). Difractogramele contin atat maximele de difracție specifice SnO₂ cât și Fe₃O₄. S-a obținut o valoare medie de 14 nm pentru cristalitele de magnetită si 6 nm pentru cele de SnO₂.</p> <p>(ii) Am caracterizat morfologic nanocompozitele Fe₃O₄/SnO₂, SnO₂/TiO₂ si am obținut o dimensiune medie a nanoparticulelor de ~ 12 nm.</p> <p>593. Am efectuat analiza calitativă și cantitativă prin Spectroscopia de fotoelectroni cu excitare in domeniul razelor-X</p>

	<p>(XPS). De asemenea , am evidențiat formarea structurii „core-shell” prin corodare succesivă cu ioni de Ar .</p> <p>(iv). Am corelat rezultatele obținute cu datele experimentale de sinteza în vederea optimizării metodei de preparare a nanocompozitelor Fe₃O₄/SnO₂, SnO₂/TiO₂</p> <p>3. Am întocmit raportul de faza sintetic și fisele CDI aferente indicatorilor de rezultat obținuți (componente ale raportului de faza <i>in extenso</i>): metoda (1), produse (1).</p>
<p>Faza3: Obținerea și caracterizarea magnetică a sistemelor cuplate de tipul CoPt/Fe₃O₄</p>	<p>Activități:</p> <p>1. Am obținut materialul magnetic Fe₃O₄@CoPt de tip dur/moale cuplat prin schimb. Am optimizat parametrii de sinteză în vederea obținerii de nanoparticule de tip miez@coaja, pentru aceasta am recurs la inversarea miezului propus inițial (CoPt) cu coaja(Fe₃O₄). Pentru îndeplinirea obiectivului am parcurs următoarele etape:</p> <p>(i) Am sintetizat nanoparticulele de ehaviour prin metoda coprecipitării pornind de la saruri de fier.</p> <p>(ii) Am sintetizat nanoparticulele de tip miez@coaja Fe₃O₄@CoPt utilizând metoda seeding. Am optimizat parametrii de sinteză pentru a obține stoechiomateria dorită.</p> <p>593.0.0 Am realizat analiza compozițională, structurală, microstructurală și ehaviour a probelor sintetizate.</p> <p>(iv) Am corelat rezultatele analizelor efectuate cu compoziția stoechiometrică a materialelor obținute</p> <p>2. Am întocmit raportul de faza sintetic și fisele CDI aferente indicatorilor de rezultat obținuți (componente ale raportului de faza <i>in extenso</i>): metoda (1), baza de date (1)</p>
<p>Faza4: Obținerea de nanocatalizatori pe baza de fier și/sau mangan prin metode biosintetice și caracterizarea acestora</p>	<p>Activități:</p> <p>1 Am implementat o nouă metodă de laborator pentru obținerea MnO₂ prin procedeu biosintetic. Pentru aceasta am parcurs următoarele etape:</p> <p>593.0.0 Am efectuat un studiu de literatură pentru a putea identifica metoda optimă, chimică, de preparare MnO₂;</p> <p>(ii) Am stabilit care component din metoda chimică poate fi înlocuit cu extractul de plante pentru a trece la o metodă biosintetică eficientă, metoda avantajoasă față de metodele clasice datorită scăderii prețului de sinteză și utilizării unor substanțe mai puțin poluante;</p> <p>593.0.0 Am caracterizat nanoparticulele obținute și le-am comparat cu cele rezultate din sinteză chimică, dovedindu-se faptul că cele obținute biosintetic au o suprafață specifică mult mai mare;</p> <p>(iv) Am realizat teste preliminare privind activitatea catalitică a nanoparticulelor de MnO₂ pentru obținerea de biocombustibil;</p> <p>2. Am sintetizat și caracterizat nanoparticule de tip Fe₃O₄/MnO₂ și Fe/MnO₂;</p> <p>3. Am întocmit raportul de faza sintetic și fișa CDI aferentă indicatorului de rezultat obținut (componente ale raportului de faza <i>in extenso</i>): metoda (1).</p>

Proiectul PN16-30 02 06: Proiectarea și dezvoltarea de noi soluții pentru optimizarea de procese în separarea izotopilor stabili

<p>Faza 1: Calculul parametrilor de</p>	<p>Activități:</p>
--	---------------------------

<p><i>funcționare la presiune a coloanei primare de separare a izotopului ^{15}N</i></p>	<ol style="list-style-type: none"> 1. S-a realizat o metodă de calcul al parametrilor funcționali ai coloanei primare de separare izotopică a ^{15}N. Metoda utilizată a presupus realizarea următorilor pași: <ol style="list-style-type: none"> i. S-a calculat transportul izotopic în coloana primară a instalației 1 de producere a izotopului ^{15}N; elaborare algoritm de calcul. ii. S-a calculat concentrația izotopică de la baza coloanei primare de separare iii. S-a evaluat debitul maxim de produs al unei coloane (instalații) de separare a izotopului ^{15}N iv. S-a calculat viteza de transfer interfazic și înălțimea echivalentă talerului teoretic (HETP) pentru coloana primară a instalației 1 de producere a izotopului ^{15}N v. S-a evaluat consumul de dioxid de sulf în etajul 1 și 2 al refluxorului de produs al coloanei primare la presiunea atmosferică și la presiuni până la 1,5 atm (suprapresiune) vi. S-a calculat producția coloanei primare și a cascadei de separare a izotopului ^{15}N pentru diferite presiuni de operare până la 1,5 atm (suprapresiune) și diferite încărcări (debite) ale coloanei primare. 2. S-a întocmit raportul de fază sintetic și fișa CDI aferentă indicatorului de rezultat obținut – metode (1)
<p>Faza 2: <i>Dimensionarea, proiectarea și realizarea primului etaj al refluxorului metalic de produs pentru coloana primară și a sistemului de reglare automată a debitului de dioxid de sulf</i></p>	<p>Activități:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. S-a construit primul etaj al refluxorului metalic de produs pentru coloana primară a instalației de separare a ^{15}N. Pentru realizarea lui, au fost parcurse următoarele etape: <ol style="list-style-type: none"> i. Calcul și dimensionare componente și repere, identificarea materialelor compatibile procesului și condițiilor de funcționare ii. Proiectarea ansamblului refluxorului și subansamblelor componente iii. Realizarea componentelor și subansamblelor, curățirea și asamblarea acestora iv. S-a efectuat un test de coroziune a unui tronson de 30 cm lungime, 100 mm diametru interior, din oțel inoxidabil austenitic, teflonat în interior în prezență de acid sulfuric de cca. 65% și în prezență de acid azotic de cca. 48%. v. S-a montat refluxorul în vederea efectuării testelor și a stabilirii tehnologiei de separare la presiune 2. S-a proiectat și realizat sistemul de reglare automată a debitului de dioxid de sulf admis în baza etajului 1 a refluxorului de produs. Pentru aceasta s-au făcut următoarele: <ol style="list-style-type: none"> i. Elaborarea unui model funcțional de controler Fuzzy ii. Programare în mediu grafic platforma Lab View iii. Elaborarea algoritmului de control al procesului iv. Proiectare și realizare interfețe programabile v. Proiectare programe în limbaj C pentru gestionarea funcțiilor programabile vi. Calibrare și testare a sistemului de reglare automată 3. S-a întocmit raportul de fază sintetic și în extenso precum și fișele CDI pentru proiectele tehnice și modelele experimentale realizate
<p>Faza 3: <i>Dimensionarea, proiectarea și realizarea celui de al doilea etaj al refluxorului metalic de produs pentru</i></p>	<p>Activități:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. S-a construit etajul 2 al refluxorului de produs al coloanei primare a instalației de separare a ^{15}N. Pentru realizarea lui, au fost parcurse

<p>coloana primară și a sistemului de reglare automată a debitului de dioxid de sulf</p>	<p>următoarele etape:</p> <ol style="list-style-type: none"> i. Calcul și dimensionare componente și repere, ținând cont de caracteristicile procesului, substanțele chimice implicate și condițiile de funcționare ii. Proiectarea ansamblului refluxorului, subansamblelor componente și a reperelor; elaborarea desenelor de execuție iii. Realizarea componentelor și subansamblelor, curățirea și asamblarea acestora iv. S-a montat refluxorul în vederea efectuării testelor și a stabilirii tehnologiei de separare la presiune v. Testarea la neetanșeități a ansamblului refluxorului <p>2. S-a proiectat și realizat sistemul de reglare automată a debitului de dioxid de sulf admis în baza etajului 2 a refluxorului de produs.</p> <ol style="list-style-type: none"> i. Proiectarea protocolului special de comunicație de tip MODBUS RTU ii. Proiectarea și realizarea unei interfețe inteligente de sincronizare iii. Scriere program interfață de sincronizare iv. Elaborarea algoritmului pentru generarea gradientului termic la nivelul refluxoarelor v. Elaborarea și acordarea setului de reguli din componența procesorului Fuzzy <p>3. S-a întocmit raportul de fază sintetic și în extenso precum și fișele CDI pentru proiectele tehnice și modelele experimentale realizate</p>
--	--

3.1. Proiecte contractate:

Cod obiectiv	Nr. proiecte contractate	Nr. proiecte finalizate	2016
1. PN 16 01 Valorificarea potentialului de piață al rezultatelor CD din INCDTIM prin dezvoltarea de soluții inovative în domeniul energiilor alternative, tehnologiilor izotopice și al ingineriei Hi-Tech	4	0	4
2. PN 16 02 Identificarea și optimizarea de noi aplicații ale proceselor izotopice și moleculare în depoluare, separare izotopică, dezvoltarea de dispozitive moleculare și (nano)materiale funcționalizate ca bază pentru creșterea în continuare a capacității de transfer tehnologic a INCDTIM	6	0	6
Total:	10	0	10

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

	lei
	2016
I. Cheltuieli directe	8.109.292
1. Cheltuieli de personal	6.638.404
2. Cheltuieli materiale și servicii	1.470.888
II. Cheltuieli Indirecte: Regia	6.589.851
III. Achiziții / Dotări independente din care:	2.245.700
1. pentru construcție/modernizare infrastructura	0
TOTAL (I+II+III)	16.944.843

3. Analiza stadiului de atingere a obiectivelor programului

Cele doua obiective majore ale programului Nucleu „TEHNOLOGII IZOTOPICE SI MOLECULARE: DE LA CERCETARE-DEZVOLTARE LA INOVARE – IZOMOL (PN16-30)” au asociate fiecare (prin Macheta I la propunerea de program) cate o serie de *tinte concrete*. Gradul in care acestea au fost atinse dupa un an de derulare il vom cuantifica in continuare in functie de numarul de indicatori indepliniti, raportat la numarul de total indicatori propusi pentru fiecare dintre tintele. Pe baza acestei metodologii de analiza, stadiul de indeplinire al obiectivelor asumate se prezinta in felul urmator:

Obiectiv 1: *Valorificarea potentialului de piată al rezultatelor CD din INCDTIM prin dezvoltarea de soluții inovative în domeniul energiilor alternative, tehnologiilor izotopice si al ingineriei Hi-Tech*

Tinte:

- ✓ *Extinderea ofertei de servicii a INCDTM cu patru noi aplicatii bazate pe tehnologii izotopice, orientate catre cerintele pietei. Indicatori: propusi 17 / realizati 12 (metoda 1, baze de date 2, matrici alimentare noi amprentate izotopic 2, lucrari stiintifice 4, comunicari la conferinte 2, propunere proiect 1)*
- ✓ *Dezvoltarea in cadrul INCDTIM a unui lant valoric complet al tehnologiilor bazate pe imbogatire izotopica: separare izotopica, marcare izotopica si utilizarea compusilor marcati. Indicatori: propusi 14 / realizati 5 (produse finite 3, tehnologie de laborator 1, metoda 1)*
- ✓ *Cresterea eficientei de captare, conversie si economica a grupurilor ehaviour ce folosesc energia solara ehaviours. Indicatori: propusi 9 / realizați 4 – 3 din cei propusi inițial și 1 suplimentar (1 metodă, 2 modele experimentale, 1 articol media); Suplimentar față de indicatorii propuși a fost realizat un (1) articol in revista Market Watch, eveniment de mediatizare a științei și tehnologiei.*
- ✓ *Determinarea ratei maxime de utilizare a masei active din electrozii bateriilor plumb-acid si reducerea gradului de uzura al bateriei versus numar de cicluri de incarcare. Indicatori: propusi 6 / realizați 2 (1 metoda, 1 produs informatic)*
- ✓ *Implementarea de procedee moderne, neconvenționale, in aplicatii din domeniul campului electromagnetic EM pentru: (i) conversia electrosmogului (poluare EM) in energie pentru aplicatii autonome (energie electrica, masa vegetala); (ii) procesare necatalitica in camp de microunde de putere a deseurilor de ulei de motor uzat (pentru conversia in materie prima destinata combustibilului de tip biodiesel). Indicatori: propusi 15 / realizați 13 – 6 din cei propusi inițial și 7 suplimentari (1 schemă de realizare, 1 metodă, 1 model experimental, 1 prototip, 3 cereri de brevetare, 1 workshop, 4 emisiuni TV, 1 articol media) ; Suplimentar față de indicatorii propuși au fost realizate: patru (4) emisiuni TV , un (1) articol în revista Market Watch – evenimente de mediatizare a științei și tehnologiei, o (1) cerere de brevetare și un (1) workshop internațional.*
- ✓ *Dezvoltarea capacitatii INCDTIM de a oferi solutii eficiente de utilizare a hidrogenului ca vector de energie prin dezvoltarea de materiale noi cu proprietati superioare de stocare a hidrogenului si de cataliza a reactiilor de transformare a acestuia. Indicatori: propusi 22 / realizati 16 (metode 3, materiale 4, proiecte depuse 3, lucrari stiintifice 2, participari la conferinte 4)*
- ✓ *Dezvoltarea mecanicii „mini-drawer” si a sistemului de manipulare al acesteia, contributie majora in realizarea noii electronici TileCal a detectorului ATLAS pentru a raspunde provocarilor High Luminosity – Large Hadron Collider de la CERN Geneva. Indicatori: propusi 16 / realizati 18 (proiecte tehnice de executie 2, modele experimentale 2, prototipuri 2, documentatii 2, comunicari stiintifice 8)*

Obiectiv 2: *Identificarea si optimizarea de noi aplicatii ale proceselor izotopice si ehaviour in depoluare, separare izotopica, dezvoltarea de ehaviours ehaviour si (nano)ehaviou functionalizate ca baza pentru cresterea in continuare a capacitatii de transfer tehnologic a INCDTIM*

Tinte:

- ✓ *Noi metode de micro/nanofabricatie si materiale micro/nanostructurate destinate aplicatiilor in domeniul micro/nanotehnologiilor, nanomedicinei, senzorilor, termoelectricitatii si electronicii moleculare. Indicatori: propusi 90 / realizati 53 (Studii 6, Metode 5, Protocoale exeperimentale 2, Modele experimentale 2, Materiale micro/nanostructurate 6, Lucrari stiintifice 2, Brevet 1, Stagii de specializare 2, Comunicari la manifestari stiintifice 13, proiecte propuse in competitii PN III 14).*
- ✓ *Obtinerea de noi ehaviou nanostructurate cu proprietati controlabile necesare aplicatiilor in nanomedicina si mediu, cu impact in cresterea atractivitatii INCDTIM pentru parteneriate cu industria. Propusi 28 / realizati 16 (Materiale noi: 3*

Metode: 1, Publicatii stiintifice: 5, Cereri de brevet: 1, Studii: 6, Manifestari stiintifice: 4, Propuneri de proiecte in competitii interne: 6, Proiecte depuse în colaborare cu parteneri economici: 2)

- ✓ *Integrarea activitatilor CDI din INCDTIM destinate aplicatiilor farmaceutice prin dezvoltarea de formulari mai eficiente ale substantei active si explorarea de noi abordari analitice ale interactiunii cu tinta.* Indicatori: propusi 30 / realizati 19 (Articole stiintifice: 2, Articole media: 1, Manifestari stiintifice: 11, Studii: 4, Sisteme supramoleculare medicament-transportor: 1)
- ✓ *Dezvoltarea de instrumente analitice adecvate caracterizarii unor materiale cu grad mare de complexitate, inaccesibile prin tehnici conventionale.* Indicatori: propusi 19 / realizati 3 (Articole stiintifice: 1, Metode noi: 2)
- ✓ *Testarea / optimizarea eficientei de adsorbție a poluantilor organici si metalelor grele din apa a cel puțin 15 materiale de tip MOF, OMC si BIOCHAR ca baza pentru implementarea de noi solutii practice in depoluare.* Indicatori: propusi 26 / 14 realizati (studii 2, metode 2; articole stiintifice 4; materiale noi 1; retete optimizate 5)
- ✓ *Realizarea de materiale magnetice compozite nanostructurate pe baza de Fe destinate magneților cu produs energetic ridicat precum si nanocatalizatorilor destinați producerii de biocombustibili.* Indicatori: propusi 10 / realizati 7 (Publicatii stiintifice: 2, Metode: 1, Manifestari stiintifice: 3, Materiale noi: 1)
- ✓ *Obtinerea de noi ehaviou nanocompozite semiconductoare destinate aplicatiilor cu rol de absorber in ehavio solare de generatia IV.* Indicatori: propusi 10 / realizati 0 (Aceasta subtematica face obiectul fazelor programate pentru)
- ✓ *Obtinerea de noi ehaviou nanostructurate oxidice si vitroceramice destinate ehaviour electrozilor pentru baterii Li-ion, si electrozilor pentru baterii cu Pb.* Indicatori: propusi 9 / realizati 9 (Publicatii stiintifice: 2, Metode: 1, Manifestari stiintifice: 4, Materiale noi: 1, Studii: 1)
- ✓ *Demonstrarea la nivel de model experimental a solutiei constructive pentru reciclarea la dioxid de sulf a deșeurii de acid sulfuric din instalația de producere a 15N.* Indicatori: propusi 10 / realizati 9 (proiecte tehnice 4, modele experimentale 4, metoda 1)
- ✓ *Creșterea cu cel puțin 10% a eficienței de producere a izotopului 15N prin optimizarea presiunii de operare a instalației și automatizarea procesului de separare.* Indicatori: propusi 10 / realizati 0 (fac obiectul fazelor programate pentru 2017)

Analiza acestor indicatori pentru toate proiectele implementate, respectiv fazele derulate in cadrul fiecaruia, ne conduce la urmatoarele concluzii:

1. Indicatorii asumati au fost indepliniti aproape in totalitate pe fazele care au fost finantate in anul in curs.
2. Singurii indicatori propusi care inca nu au fost indepliniti in totalitate se refera la articolele stiintifice: fata de articolele publicate / trimise spre publicare pe care le raportam, mai exista alte 9 articole aflate in faza de elaborare (corespunzatoare fazelor care s-au finalizat la sfarsitul anului 2016)
3. In aceste conditii, apreciem ca indicatorii indepliniti pana in prezent ofera premisele pentru a putea atinge in final toate tintele propuse.

4. Prezentarea rezultatelor:

4.1. Stadiul de implementare al proiectelor componente

Denumirea proiectului	Tipul rezultatului estimat	Stadiul realizării proiectului
1. PN16-30 01 01: Noi aplicatii ale tehnologiilor izotopice	Tehnologie de laborator: 1 Metode noi: 2 Produce noi: 3 Baze de date: 2	Au fost obtinuti toti indicatorii de rezultat propusi pentru fazele proiectului implementate in 2016: Tehnologie de laborator. Obținerea de derivati ai catecoloului, deuterati selectiv; Produce noi in oferta de compusi marcati ai INCDTIM (3), derivati ai catecoloului deuterati selectiv: <ol style="list-style-type: none"> 1. Cathecol-D6 (99 %): $C_6D_4(OD)_2$ 2. Dopamine:HCl – ring D3, -ND2, -O₂D2 (98-99 %): $C_6D_3(OD)_2(CH_2)_2ND_2$ 3. L-Dopa – ring D3, -ND2, -O₂D2 (98-99 %): $C_6D_3(OD)_2(CH_2)ND_2COOD$

		<p>Metoda. <i>Obținerea acidului clorhidric deuterat din clorura de benzoil și apa deuterată – comparativ cu metodele tradiționale, are avantajul că necesită o instalație tehnologică cu un singur reactor, are costuri finale mai reduse, iar produsul secundar poate fi valorificat pentru obținerea de esteri benzoici</i></p> <p>Metoda. <i>Autentificarea medicamentelor pe baza amprentei izotopice a carbonului ($^{13}C/^{12}C$) – permite monitorizarea unui produs farmaceutic, constituind astfel un instrument eficient în combaterea contrafacției</i></p> <p>Baza de date 1. <i>S-a inițiat prima bază de date pentru amprentarea izotopică a produselor farmaceutice – deoarece tehnica autentificării unui produs utilizând amprenta sa izotopică este o tehnică comparativă, care necesită existența amprentelor izotopice ale unor probe martor, crearea acestei baze de date este obligatorie în procesul de dezvoltare al metodei de autentificare propuse</i></p> <p>Baza de date 2. <i>S-a inițiat prima bază de date care conține valorile izotopice ale fructelor de pădure din Transilvania – această bază de date reprezintă un instrument indispensabil pentru autentificarea și trasabilitatea produselor pe baza de fructe de pădure.</i></p>
<p>2. PN16-30 01 02: Tehnologii avansate pentru producere, recuperare și stocare de energie</p>	<p>Schemă de realizare: 1 Model experimental: 3 Prototip aparat: 1 Metodă: 3 Cerere de brevetare: 3 Produs echivalent: 1</p>	<p>Au fost obținuți următorii indicatorii de rezultat:</p> <p><u>Schemă de realizare (1)</u> 1.Schemă de realizare a circuitului de conversie și a antenei de recepție se referă la proiectarea unei antene redresoare, la documentele de execuție – desene și fișiere aferente procesului de prototipare PCB și la caracterizarea – validarea produsului executat.</p> <p><u>Model experimental (3)</u> 1.Model experimental funcțional al unui sistem de captare a câmpului de poluare EM ambientală este o soluție tehnică nouă și se caracterizează printr-o recepție a electrosmogului într-o bandă de frecvențe foarte largă, de 4 octave, între 800MHz și 13GHz și o conversie a lui în energie electrică de curent continuu cu dublare de tensiune într-o configurație electronică în care capacitatea intrinsecă a antenei este parte din dublarea de tensiune. 2.Model experimental funcțional al unui grup generator electric pe bază de radiație solară concentrată. Acest model experimental conține două panouri solare și două lentile de tip Fresnel. Rotirea automată după soare se face cu ajutorul a două motoare cuplate la reductoare melcate (raport de 447000:1 în jurul axei Z și 100:1 în jurul axei X). 3.Model experimental pentru estimarea eficienței de conversie a energiei solare. Modelul realizat include un trepied inteligent, AZ-EQ6 GT Mount ce</p>

		<p>permite atât orientare azimutală cât și ecuatorială pentru suprafața unui panou fotovoltaic, sistem de prindere a panoului fotovoltaic, panou fotovoltaic și element de stocare a energiei pentru mișcarea autonomă a monturii trepiedului. Astfel radiația solară incidentă este perpendiculară pe suprafața panoului pe întreg parcursul unei zile.</p> <p><u>Prototip aparat (1)</u> 1.Prototip aparat/instalație de udare automată a plantelor, cu funcționare autonomă (alimentare solară) având următoarele elemente de noutate: senzor de umiditate al solului inteligent, cu firmware reprogramabil, conținând un traductor capacitiv izolat realizat integral din PCB, distribuit volumetric; automat de micro-irigare cu alimentare solară și amplasare mobilă pe rezervor de apă de tip butelie PET de 4-10l.</p> <p><u>Metodă (3)</u> 1.Metoda referitoare la caracterizarea suprafeței efective (A_{eff}) de colectare a energiei electrosmogului pentru o antenă utilizată în aplicația de antenă redresoare. 2.Metoda pentru determinarea aportului de putere adus de sistemul de urmărire solară folosind o sarcină fixă. 3.Metodă rapidă de producere a electrozilor pentru baterii plumb-acid, care include toate etapele, de la realizarea desenului (format electronic sau pe hârtie) până la decuparea electrodului.</p> <p><u>Cerere de brevetare (3)</u> 1.Cerere de brevetare „Antenă de bandă largă și antenă redresoare realizată cu această antenă pentru colectarea electrosmogului și conversia lui în energie electrică” se referă la o antenă de bandă largă (800MHz-13GHz) și un dispozitiv –antena redresoare, compus din antena conectată la un convertor de câmp electromagnetic în energie electrică de curent continuu (DC). 2.Cerere de brevetare „Automat mobil pentru micro-irigare cu măsurarea umidității solului și funcționare autonomă” se referă la măsurarea și controlul umidității solului în agricultura de precizie, horticultura și floricultura prin dozarea cantității optime de apă în sol. Automatul poate fi utilizat pentru jardinieră sau ghivece în apartament sau în casa, solar, seră sau direct pe câmp. 3.Cerere de brevetare „Dispozitiv de încălzire cu microunde” este o soluție de omogenizare a distribuției de microunde pe baza unui cristal fonic, soluție ce crește eficiența de tratament termic cu microunde și economia de energie.</p> <p><u>Produs ehaviours (1)</u> 593.00.00 Produs ehaviours: program pentru determinarea paternului electrozilor în funcție de distribuția de</p>
--	--	---

		<p>ehavio la suprafața electrodului unei baterii Pb-acid. Datele de intrare sunt dimensiunile electrodului și ehaviour poziția colectorului, iar ca date de output sunt livrate linii echipotențiale, traiectorii care minimizează gradientul și analiza structurii geometrice a grilei.</p>
<p>593.0.0 PN16-30 01 03: Inginerie Hi-Tech in cadrul participarii INCDTIM la experimentul ATLAS-LHC de la CERN Geneva</p>	<p>Documentatii: 2 Modele experimentale: 2 Produce: 2</p>	<p>Au fost realizati toti indicatorii de rezultat propusi pentru fazele proiectului implementate in 2016:</p> <p>Documentatii: - Proiect de executie al Mecanicii Mini-Drawer (MMD) - - Proiect de executie model experimental Sistem de Manipulare Mini-Drawere (SMMD)</p> <p>Modele experimentale: - Mecanica Mini-Drawer - Sistem de Manipulare Mini-Drawer</p> <p>Produce: - Sistem de manipulare al modulelor Long Barrel ale Tile Calorimeter. - Stand de incercare MMD si SMMD</p>
<p>593.0.0 PN16-30 01 04: Hidrogenul ca vector de energie – metode noi pentru stocarea si utilizarea hidrogenului in scopuri energetice</p>	<p>Metode noi: 2 Metoda optimizata si scalata: 1 Materiale noi: 4</p>	<p>Au fost realizati toti indicatorii de rezultat propusi pentru anul 2016:</p> <p>Metoda: Metoda de preparare si caracterizare a materialelor composite de tipul <i>Ni@MOF</i> – permite prepararea materialelor <i>Ni@UiO-66</i> si <i>Ni@MIL-101</i> cu dispersie foarte buna a metalului si pastrarea proprietatilor ehavio ale suportului (aria suprafetei, porozitate, cristalinitate et.)</p> <p>Metoda: Metoda de preparare si caracterizare a materialelor composite <i>Pt@UiO-66</i> – permite prepararea materialului compozit bazat pe UiO-66 cu o dispersie foarte buna a nanoparticulelor de Pt si cu pastrarea proprietatilor suportului</p> <p>Metoda optimizata si scalata: Metoda ecologica optimizata de preparare a compusului MIL-101 la scara de 10g/sarja</p> <p>Materiale noi: <i>Ni@UiO-66</i>; <i>Ni@MIL-101</i>; <i>Pt@UiO-66</i></p> <p>Electrod modificat cu HKUST-1 cu activitate catalitica in electro-oxidarea metanolului si acidului formic cu potential de utilizare ca anod in pilele de combustie cu alimentare directa de combustibil lichid</p>
<p>593.0.0 PN16-30 02 01: Tehnici de micro-si nano-fabricatie dedicate dezvoltarii de dispozitive moleculare respectiv termoelectrice si a senzorilor pe baza de grafene</p>	<p>Studii 6 Metode 5 Protocoale Exeperimentale 2 Modele experimentale 2 Materiale micro/nanostructurate 6 Brevet 1</p>	<p>Au fost realizati toti indicatorii de rezultat propusi pentru anul 2016:</p> <p>STUDII: Studiu privind obtinerea de electrozi interdigitati modificati cu un material nanocompozit pe baza de chitosan si grafene dopate cu atomi de azot, utilizati la detectia ionilor de metale grele (Cu^{2+}; Pb^{2+})</p> <p>Studiu privind fabricarea de electrozi micro/nano-structurați pentru senzori electrochimici prin</p>

		<p>litografie laser</p> <p>Studiu privind modul de adsorbție controlată a cloro-subftalocianinelor cu bor (Sub-PC) pe suprafața de Ag(111).</p> <p>Studiu privind fabricarea și caracterizarea unei diode hibride organic-anorganic pe bază de compuși moleculari cu centri metalici</p> <p>Studiu privind obținerea de straturi ultrasubțiri de molecule organice depuse prin epitaxie ehaviour în vid ultraînalt (MBE) pe suprafețe metalice – caracterizare prin spectroscopie vibrațională.</p> <p>Studiu privind fabricarea de cerneluri moleculare bazate pe 1,4- dithiothreitol optimizate pentru functionare in tandem cu tehnica Dip Pen Nanolithography.</p> <p>METODE:</p> <p>Metoda de obtinere a unui nou material nanocompozit pe baza de chitosan si grafene dopate cu atomi de azot – comparativ cu metodele existente in literatura, metoda dezvoltata este simpla, putin costisitoare si rapida.</p> <p>Metoda de fabricare de electrozi metalici micro- și nanostructurați ca baza pentru construirea de senzori electrochimici – metoda directa si rapida, cu structurare selectiva a substratului si care nu necesita sabloane</p> <p>Metodă modernizată de obținere a joncțiunii AlZnO/ZnO/FePc/Au și NdZnO/ZnO/FePc/Au pe substrat rigid și/sau flexibil prin tehnici de depunere epitaxială cu ehaviour molecular – metoda dezvoltată extinde gradul de acuratețe în procesul de fabricare, comparativ cu metodele existente prin realizarea, dezvoltarea și caracterizarea unei diode hibride organic-anorganic pe bază de multistraturi ultra-înalt structurate, obținute prin tehnici de depunere epitaxială cu fascicul molecular.</p> <p>Metodă. Caracterizarea ehaviour și îmbunătățirea detecției ehaviour organice pe filme subțiri, prin metode spectroscopice vibraționale Raman și exploatarea ultrasensitivității SERS, are avantajul obținerii de informație ehaviou precisă la o concentrație scăzută fără a fi invazivă și necesită o ehavi ehavio de preparare și de analiză a probei.</p> <p>Metoda de obtinere a unor suprafete inscriptionate cu 1,4- dithiothreitol folosind echipamentul integrat de litografie Dip Pen Nanolithography. Un nou protocol de scriere prin varf AFM a suprafețelor de Au a fost optimizat. Etapele de scriere au fost implementate.</p> <p>PROTOCOALE EXEPERIMENTALE:</p> <p>Protocol de obtinere de filme metalice micro-si nanostructurate prin tehnici de litografie laser – comparativ cu metoda dezvoltata este directa,</p>
--	--	--

		<p>rapida, versatila si putin costisitoare.</p> <p>Protocol de determinare a geometriei ehaviour și a modului de orientare la suprafața metalică la care sunt adsorbite moleculele prin compararea spectrului Raman obținut în soluție apoasă sau pudră cu spectrele SERS obținute pe suprafețe metalice.</p> <p>MODELE EXPERIMENTALE:</p> <p>Model experimental de detectie a ionilor de metale grele din solutii apoase folosind electrozi metalici interdigitati avand suprafata activa modificata cu un nou material nanocompozit pe baza de chitosan si grafene dopate cu atomi de azot.</p> <p>Modelul experimental dezvoltat in acest studiu a urmarit fabricarea unei solutii moleculare cu 1,4-dithiothreitol (DTT), compatibila cu litografia Dip Pen Nanolithography. Aceasta tehnica ne-a permis micro-fabricarea de structuri moleculare customizate direct cu cerneala moleculara sau scrierea cu diverse specii moleculare (in cazul nostru, cu trei ioni metalici diferiti, Cr, Mn si Co) pe o suprafata (functionalizata in prealabi) într-un singur experiment.</p> <p>MATERIALE MICRO/NANOSTRUCTURATE:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. nou material nanocompozit pe baza de chitosan si grafene dopate cu atomi de azot 2. electrozi interdigitati avand suprafata activa modificata cu un nou material nanocompozit pe baza de chitosan si grafene N-dopate 3. electrozi de aur avand suprafata activa modificata cu un nou material nanocompozit pe baza de chitosan si grafene N-dopate 4. joncțiuni ZnO/FePc utilizând electrozi transparenți de AlZnO dopați și nedopați pe substrat rigid și/sau flexibil. 5. cerneala moleculara compatibila cu tehnica DPN 6. suport senzor pentru detectia ionilor metalici de Cr, Mn si Co. <p>Cerere Brevet – Procedeu de preparare și aplicare în detecția electrochimică a unui nou material nanocompozit pe bază de chitosan și grafene dopate cu atomi de azot</p>
<p>593.00 PN16-30 02 02: Materiale nanostructurate cu proprietăți controlate pentru aplicații specifice în sănătate și mediu</p>	<p>Metode noi: 1 Produse noi: 2 Studii: 3</p>	<p>Au fost obtinuti indicatorii de rezultat propusi pentru fazele proiectului implementate in 2016:</p> <p>Metoda. <i>Metoda biosintetica de obtinere a nanoparticulelor de magnetita (Fe₃O₄)</i> – metoda propusa este simpla, non-toxica si economica, constand in utilizarea de extracte apoase obtinute din deseuri vegetale, sarurile (II, III) ale Fe, si bicarbonat de sodiu NaHCO₃ (solutie apoasa de concentratie 1.1 M).</p> <p>Produse: 1) <i>Nanostructuri magnetice pe baza de polivinilimidazol dopat cu ioni ai pamanturilor rare</i></p>

		<p>2) Clusteri ehaviou de tip Fe_3O_4-EDTA</p> <p>Studii:</p> <p>1) Sinteza nanoparticulelor magnetice utilizand diferite tipuri de materiale vegetale – s-au obtinut nanoparticule magnetice utilizandu-se in procedura de sinteza extracte apoase obtinute din diverse deseuri vegetale (<i>Cucumis sativus</i>, <i>Citrus limon</i>, <i>Vitis vinifera</i>, <i>Citrus clementina</i>, <i>Cucumis melo</i>, <i>Brassica oleracea</i> var. <i>Gongylodes</i>, <i>Citrus paradisi</i>, etc.)</p> <p>2) Sinteza și influența gradului de dopaj asupra caracteristicilor ehaviour și morfologice ale nanocompozitelor de tipul Fe_3O_4-TiO_2:Eu</p> <p>3) Caracterizarea fizico-chimică a nanostructurilor magnetice de tip ehavio dopate cu pământuri rare pe bază de liganzi chelatici</p>
<p>593.0.0 PN16-30 02 03: Cercetări de frontieră dedicate dezvoltării de tehnologii moleculare</p>	<p>Metode noi: 2 Produce noi: 1 Studii: 4</p>	<p>Au fost obtinuti toti indicatorii de rezultat propusi pentru fazele proiectului implementate in 2016:</p> <p>Metoda 1: Metodă de determinare a coeficientului Seebeck prin termografie activă Metoda poate fi utilizata pentru masurarea factorului de putere (la temperatura ambianata) al termoelectricilor solizi de catre orice producator al acestui tip de materiale. Principalul avantaj al metodei consta in posibilitatea obtinerii simultane a temperaturii si a semnalului electric generat de catre termoelectric, in aceleasi puncte de control.In cazul masuratorilor coeficientului Seebeck cu termocuple, acest lucru nu este posibil, ceea ce impune corectii de masura.</p> <p>Metoda 2: Metodă de măsură a difuzivității și efuzivității termice a termoelectricilor solizi prin utilizarea tehnicii PTE Metoda poate fi utilizata pentru masurarea difuzivitatii si a efuzivitatii termice a termoelectricilor solizi prin tehnica fototermoelectrica (PTE) si se bazeaza pe masurarea semnalului electric provenit de la un generator termoelectric sau termoelement (TE) in urma variatiei de temperatura, cauzata de iradierea termoelementului cu o radiatie de natura optica. Metoda consta in iradierea termoelementului cu o sursa modulata, pe o anumite frecventa, iar semnalul este prelucrat selectiv pe aceeasi frecventa. Semnalul teoretic PTE normalizat este un semnal complex, avand o amplitudine si o faza, ambele depinzind de parametrii termici ai termoelementului.</p> <p>Produs nou: Complex supramolecular PAMAM-NH2-G5-Nal</p> <p>Studiul 1: Dinamica de ordinul (sub)picosecundelor a grupărilor funcționale caracteristice unor nucleozide și nucleotide ale acizilor nucleici prin spectroscopie Raman clasică - au fost trimise 2 articole la publicare in reviste cotate ISI; - a fost prezentata o comunicare stiintifica la o</p>

		<p>conferinta internationala.</p> <p>Studiul 2: Polifarmacoterapia investigată prin tehnici moderne de relaxometrie și difuzometrie RMN</p> <p>Studiul 3: Explorarea potențialului adjuvant al unor fitocompuși din <i>genul Plantago</i> în medicația bolilor degenerative prin interacție cu biosisteme expuse unor metaboliți toxici ai ciclofosfamidei</p> <p>Studiul 4: Obținerea de complecși supramoleculari pe bază de dendrimeri în vederea creșterii bio-disponibilității substanțelor farmaceutic active</p>
<p>593.0.0 PN16-30 02 04: Dezvoltarea unor metode alternative pentru depoluarea apei si solului</p>	<p>Metode: 2 Studii: 3 Materiale noi: 1 Retete optimizate : 5</p>	<p>Metoda 1: Metoda de preparare a oxidului de grafena partial redus – permite prepararea ehaviours a unui nou material carbonic prin reducerea controlata a functiunilor organice oxygenate de pe suprafata Oxidului de Grafena</p> <p>Material nou: Oxid de grafena partial redus</p> <p>Materiale pentru care s-a optimizat prepararea: MIL-101; H KUST-1; UiO-66; Oxid de grafena; Carbune templat</p> <p>Metoda 2. Metoda dezvoltata si optimizata de izolare și cuantificare a inhibitorilor de ardere din ape de suprafata.</p> <p>Studiu 1. Studiu privind utilizarea materiale adsorbante de tip MOF și grafena în depoluarea apelor.</p> <p>Studiu 2. Cuantificarea adsorbției contaminanților de tip metale grele din soluții sintetice și testarea adsorbanților preparați în vederea evaluării eficienței de reținere a poluanților, utilizând materiale de tip MOF și OMC.</p> <p>Studiu 3. Decontaminarea solurilor prin metode de fitoextractie si fitostabilizare</p>
<p>593.0.0 PN16-30 02 05: Nanomateriale avansate pentru producerea si stocarea de energie</p>	<p>Metode noi: 2 Produse noi: 2 Studii: 1</p>	<p>Au fost obtinuti toti indicatorii de rezultat propusi pentru fazele proiectului implementate in 2016:</p> <p>Metoda. <i>Metoda de obtinere a nanocompozitelor de tipul SnO_2/Fe_3O_4</i> – comparativ cu metodele clasice, prin acest precedeu se evita precipitarea spontană a SnO_2 in solutie (precipitare omogenă), favorizând precipitarea heterogenă pe suprafața magnetitei, fără a necesita o instalatie sofisticată.</p> <p>Metoda. <i>Sinteza nanoparticulelor de MnO_2 utilizand extracte de plante</i> – comparativ cu metoda chimica, are avantajul scaderii pretului de sinteza, utilizarii unor substante mai putin poluante si obtinerii unor nanoparticule cu o suprafata specifica mult mai mare.</p> <p>Produse noi .</p> <p>1. Produs nanocompozit de tipul SnO_2noiFe_3O_4 cu structură core-shell și proprietăți ajustabile</p> <p>2. Nanoparticule magnetic $Fe_3O_4@CoPt$ cu structură core-shell de tip dur/moale</p>

		<p>Studiu: privind obținerea unor noi electrozi de Pb pe baza de vitroceramici rezultați din reciclarea electrozilor uzați ai bateriilor acide. Prin doparea cu oxid de molibden (VI) a matricei PbO₂-Pb se evidențiază prezența ionilor de Mo⁺³, Mo⁺⁵ și Pb⁺² în probele investigate, care prezintă proprietăți optice cu posibile aplicații fotocromice. Măsurători de voltametrie ciclică pe electrozii de sticlă și vitroceramică obținuți nu au indicat performanțe electrochimice ale acestora în soluție 38% acid sulfuric, folosit ca electrolit, în acest fel, proprietățile electrochimice ale probelor studiate neputând fi demonstrate.</p>
<p>593.0.0 PN16-30 02 06: Proiectarea și dezvoltarea de noi soluții pentru optimizarea de procese în separarea izotopilor stabili</p>	<p>Metodă: 1 Proiecte Tehnice: 4 Modele experimentale: 4</p>	<p>Au fost obținuți toți indicatorii de rezultat propuși pentru fazele proiectului implementate în 2016:</p> <p>Metode (1): Calculul parametrilor de funcționare la presiune a coloanei primare de separare a izotopului ¹⁵N. Permite evaluarea: transportului izotopic, separării izotopice, debitului de produs și concentrației izotopice pentru coloana primară. S-a evaluat debitul de dioxid de sulf pentru cele două etaje ale refluxorului metalic de produs.</p> <p>Proiecte Tehnice (4):</p> <ul style="list-style-type: none"> - Proiect tehnic – Etajul 1 al refluxorului metalic de produs al coloanei primare de separare a izotopului ¹⁵N; - Proiect tehnic – Etajul 2 al refluxorului de produs al coloanei primare. <p>Proiectele tehnice prevăd realizarea celor două etaje din oțel inoxidabil austenitic. S-a adoptat soluția teflonării în interior pentru a evita coroziunea în prezența acizilor sulfurici și azotici la cald.</p> <ul style="list-style-type: none"> - Sistemul de reglare automată a debitului de dioxid de sulf pentru etajul 1 al refluxorului; - Sistemul de reglare automată a debitului de dioxid de sulf pentru etajul 2 al refluxorului. <p>Sistemele de achiziție și control a debitului de dioxid de sulf din etajul 1 și 2 al refluxorului de produs au în componența lor interfețele de achiziție cu funcții de calcul autonom, protocolul special de comunicație de tip MODBUS RTU, o interfață inteligentă de sincronizare, câte o interfață de control pentru regulatoarele de debit SO₂ și programul pentru conducerea procesului implementat pe o platformă LabView.</p> <p>Modele experimentale (4):</p> <ul style="list-style-type: none"> - Etajul 1 al refluxorului metalic de produs; - Etajul 2 al refluxorului metalic de produs. - Instalația de automatizare a debitului de dioxid de sulf pentru etajul 1 al refluxorului de produs;

		<p>- Instalația de automatizare a debitului de dioxid de sulf pentru etajul 2 al refluxorului de produs.</p> <p>Reglarea debitului de dioxid de sulf în cele două etaje ale refluxorului metalic nu se poate face decât automatizat deoarece nu mai este posibilă vizualizarea poziției zonei de reacție.</p>
--	--	---

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

Tip	Nr. ... realizat in 2016
Documentații	2
Studii	17
Lucrări	22 articole in reviste cotate ISI 61 comunicari la conferinte
Altele asemenea (<i>se vor specifica</i>)	1 (editor al documentului <i>ATL-COM-TILECAL-2016-053, Initial Design for the Phase-II Upgrade of the ATLAS Tile Calorimeter System</i>)

Din care:

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

Nr.	Titlul articolului	Numele Jurnalului, Volumul, pagina	Nume Autor	Anul publicării	Scorul <i>ehaviou de influență al articolului</i>	Nr. De citări ISI
1	Stable Isotope Fingerprinting In Pharmaceuticals Authentication	Analytical Letters	G. Cristea, D.A. Magdas, C. Voica, I. Feher	In evaluare	0.371	
2	Multi-elemental, isotopic and trace pesticides analysis of wild and cultivated berries species	Analytical Letters	F.D. Covaciu, D.A. Magdas, A. Dehelean, I.C. Feher, S. Radu	In evaluare	0.371	
3	Determination of Pesticides, Elements, and Stable Isotopes in Strawberries	Analytical Letters 49 (16): 2560-2572 doi:10.1080/00032719.2016.1140175	F.D. Covaciu, Z. Moldovan, A.A. Dehelean, D.A. Magdas, I.C. Feher, R. Puscas, M. Vlassa	2016	0.371	
4	Spectroscopic and magnetic investigations of manganese tellurite system synthesized by sol-gel method	Journal of Materials Science	Dehelean Adriana, Popa Adriana, Rada Simona, R. C. Suciu, Stan Manuela, Culea Eugen	In evaluare	1.259	
5	The electrochemical behavior of a Metal-Organic Framework modified gold electrode for methanol oxidation	Electrochimica Acta, 219, 630-637	A. Vulcu, L. Olenic, G. Blanita, C. Berghian-Grosan	2016	1,681	
6	Methanation of CO ₂ on Ni/γ-Al ₂ O ₃ : influence of Pt, Pd or Rh promotion	Catalysis Today DOI:10.1016/j.cattod.2016.12.001	M. Mihet, M.D. Lazar	2017	2.973	
7	Electrochemical Platform based on Nitrogen-doped Graphene /	Nanotechnology	Lidia Magerusan, Crina Socaci, Maria	In evaluare		

	Chitosan Nanocomposite for Selective Pb ²⁺ Detection		Coros, Florina Pogacean, Marcela C. Rosu, Stefan Gergely, Stela Pruneanu, Cristian Leostean and Ioan Ovidiu Pana			
8	DFT and TD-DFT approach to the electronic and spectroscopical properties of [Ru(tpy) ₂] ²⁺	Journal of Molecular Modeling	Adrian Calborean, Florin Graur, Vasile Bintintan, Luiza Iarinca Buimaga	In evaluare		
9	Magnetic recoverable Fe ₃ O ₄ -TiO ₂ :Eu composite nanoparticles with enhanced photocatalytic activity	Applied Surface Science 390, 248–259	M. Stefan, C. Leostean, O. Pana, D. Toloman, A. Popa, I. Perhaita, M. Senila, O. Marincas, L. Barbu-Tudoran	2016	1.476	
10	Synthesis, characterization and cytotoxicity evaluation of high magnetization multifunctional nanoclusters	Journal of Nanoparticle Research, acceptat DOI: 10.1007/s11051-016-3685-6	Anca Petran, Teodora Radu, Alexandrina Nan, Diana Olteanu, Adriana Filip, Simona Clichici, Ioana Baldea, Maria Suci, Rodica Turcu	2016	1.538	
11	Removal of antibiotics from aqueous solutions by green synthesized magnetite nanoparticles with selected agro-waste extracts	Process Safety and Environmental Protection	M. Stan, I. Lung, M.L. Soran, C. Leostean, A. Popa, M. Stefan, T.D. Silipas, A.S. Porav	In evaluare	1.661	
12	An active thermography approach for thermal and electrical characterization of thermoelectric materials	Journal of Physics D: Applied Physics Vol. 49 285601	M. Streza, S Longuemart, E Guilmeau, K Strzalkowski, K Touati, M Depriester, A Maignan and A Hadj Sahraoui	2016	2.67	
13	Spectroscopic and DFT investigation of benzaldehyde isonicotino – hydrazide compound	Rom. Journ. Phys. 61, No. 7-8, 1265-1275 (2016)	I. B. Cozar, A. Pîrnău, L. Szabo, N. Vedeanu, C. Nastasă, O. Cozar	2016	0.435	
14	Raman photoluminescence and EPR spectroscopic characterization of europium(III) oxide-lead dioxide-tellurite glassy network	Journal of Luminescence 177, 65-70	A. Dehelean, S. Rada, A. Popa, R.C. Suci, E. Culea	2016	1.207	
15	Spatial and seasonal variation of organic pollutants in surface water using multivariate statistical techniques	Water Science and Technology – acceptata (doi:10.2166/wst.2016.351)	Ioana Feher, Zaharie Moldovan, Ioan Oprean	2016	0.668	
16	Purification of Wastewater using a Highly-Porous Metal Organic Framework and Nanostructured	Analytical Letters – DOI:10.1080/000327.19. 2016.1263646	C. Voica, M.D. Lazar, G. Blanita	2016	0.371	

	Carbon					
17	Elemental distribution among <i>Phaseolus Vulgaris</i> plant parts, irrigated with water having different isotopic composition	Turkish Journal of Agriculture and Forestry	Adriana Dehelean, Dana Alina Magdas, Gabriela Cristea, Ioana Feher, Romulus Puscas, Zoltan Balazs	In evaluare	1.071	
18	The status of molybdenum ions in the lead dioxide-lead glasses and vitroceramics	J Non-Cryst Solids 453 (2016) 36–41	R. – C. Suciu, M. Rada, E. Culea, Al. Biriş, S. Rada, C. Leostean, M. Suciu, I. Marian, Z. H.Wu, Z. Jing	2016	0.438	
19	New properties of Fe ₃ O ₄ @SnO ₂ core shell nanoparticles following interface charge/spin transfer,	Journal of Physics D: Applied Physics	C. Leostean, O. Pana, M. Stefan, A. Popa, D. Toloman, S. Gutoiu, S. Macavei.	In evaluare	2.064	
20	Biofuel production from vegetable oil using chemical and biological synthesized MnO ₂ nanocatalyst	Ultrasonics Sonochemistry	M.L. Soran, I. Lung, C. Leostean, O. Pana, I. Kacso, A. Stegarescu, S. Porav, M. Stan, O. Opris, D. Lazar, S. Gutoiu, L. Copolovici	In evaluare	2.23	
21	Structure and magnetic properties of CoFe ₂ O ₄ /SiO ₂ nanocomposites obtained by sol-gel and post annealing pathways	Ceramics International, In Press, acceptat http://dx.doi.org/10.1016/j.ceramint.2016.10.192	T. Dippong, O. Cadar, E. A. Levei, I. Bibicu, L. Diamandescu, C. Leostean, M. Lazar, G. Borodi, L. Barbu Tudoran	2017	3.0	
22	Effect on the characteristic of bonding and local structure in molybdenum-lead-lead dioxide glasses and vitroceramics = (articol in curs de acceptare)	Journal of Alloys and Compounds	M. Rada, M. Zagrai, S. Rada, A. Bot, E. Culea	In evaluare	0.556	

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

Nr. Crt.	Titlul articolului, Manifestarea științifică, Volumul, Pagina nr.	Nume Autor	An apariție	Nr. Citări ISI
1	„Stable Isotope Fingerprinting In Pharmaceuticals Authentication”, IC-ANMBES 2016, 29 iunie- 1 iulie, Brasov, Romania, Book of abstracts, pg 152, ISSN 2360-3461	G. Cristea, D.A. Magdas, C. Voica, A. Dehelean	2016	
2	„Multi-elemental, isotopic and trace pesticides analysis of wild and cultivated berries species”, The Fourth Edition of International Conference on Analytical and Nanoanalytical Methods for Biomedical and Environmental Sciences „IC-ANMBES”, 29 iunie-1 iulie, 2016, Brasov, Romania. Book of abstracts, pg 155, ISSN 2360-3461	F.D. Covaciu, D.A. Magdas, A. Dehelean ¹ , I.C. Feher, G.I. Cristea, R. Puscas	2016	
3	“Two types of motion in heterogeneous internally-heated	Emanoil Surducan,	2016	

	mantle convection” – Workshop „Flow in the deep Earth” College de France, 01-02 Dec.2016, Paris, Franța (https://www.college-de-france.fr)	Vasile Surducan, Camelia Neamtu (INCDTIM-RO) Angela Limare, Loic Fourel, Cinzia Farnetani, Edouard Kaminski, Claude Jaupt (IPGP-FR)		
4	Mechanics Status and Plans for TileCal FE Electronics Upgrade, Tile Calorimeter Week, CERN Geneva,17-19 Febr. 2016 (https://indico.cern.ch/event/491599/)	G. Popeneciu	2016	
5	Lifting Beam modification for TileCal Barrel Module manipulation in TB area, Tile Upgrade Demonstrator Expert Week, CERN Geneva, 16 th March 2016, (https://indico.cern.ch/event/505440/)	G. Popeneciu, N. Topilin	2016	
6	Test beam Infrastructure preparation Modified Lifting Beam for LB module installation, ATLAS Upgrade Week, CERN Geneva, 18-22 April 2016 (https://indico.cern.ch/event/515848/)	G. Popeneciu	2016	
7	<i>Test Beam Installation- Status of the Infrastructures</i> , Tile Calorimeter Week, CERN Geneva, 22-24 June 2016 (https://indico.cern.ch/event/542834/)	G. Popeneciu, I. Minashvili	2016	
8	<i>Tile Calorimeter Upgrade Status and Plans</i> , ATLAS Romania Annual Meeting, 4 th July 2016, Brasov (https://indico.cern.ch/event/518511/)	G. Popeneciu	2016	
9	<i>TileCal Maintenance 2016: Operation tasks, detector maintenance, repairs and consolidation</i> , 4 th July 2016, Brasov (https://indico.cern.ch/event/518511/)	S. Pogacian	2016	
10	<i>Demonstrator Cooling System Review</i> , Tile Calorimeter Week, CERN Geneva, 12-14 October 2016 (https://indico.cern.ch/event/573823/)	G. Popeneciu	2016	
11	<i>TileCal Test Beam September 2016 – Hardware Status</i> , 12- 14 October 2016 (https://indico.cern.ch/event/573823/)	I. Minashvili, G. Popeneciu, S. Nemecek	2016	
12	“Modified electrodes based on metal organic frameworks for electrooxidation of formic acid”, 21 st National Conference Progress in Cryogenics and Isotopes Separation, Calimanesti, 19-21 octombrie 2016	A. Vulcu, C. Berghian- Grosan, G. Blanita	2016	
13	The reductive amination of α -ketoisocaproic acid using a novel electrode modified with Leucine Dehydrogenase, RomCat 2016, Timisoara, 6-8 iunie 2016	A. Vulcu, C. Berghian- Grosan, L. Olenic	2016	
14	“Methanation of CO ₂ on Ni/Al ₂ O ₃ : Influence of Pt, Pd or Rh promotion”, The 11 th International Symposium of The Romanian Catalysis Society, RomCat 2016, Timisoara, 6-8 iunie 2016	M. Mihet, M. Dan, M. D. Lazar	2016	
15	„Metanarea catalitica a CO ₂ folosind materiale poroase – alternativa pentru stocarea si transportul energiei regenerabile”, Conferinta Stiinta Moderna si Energia, Cluj Napoca, mai 2016	M. Mihet, G. Blanita, M. D. Lazar	2016	
16	„Preparation, characterization, design and applicability of biocompatible chitosan / N-doped graphene nanocomposite in heavy metal ion detection” – ACS on Campus – 12 – 14 Mai 2016, Bucuresti, Romania – prezentare orala	Lidia Magerusan	2016	
17	“Electrochemical Sensors Based on Biocompatible Polymer / Graphene Nanocomposite for Heavy Metal Ion Detection” 14 th National Conference of Biophysics 2 – 4 Iunie 2016,Cluj-Napoca, Romania Book of abstracts, pg 50, ISSN 2248-0749	Lidia Magerusan, Crina Socaci, Florina Pogacean, Maria Coros, Marcela-Corina Rosu, Stela Pruneanu	2016	

18	„Gold electrodes modified with N-doped graphene / chitosan nanocomposite for selective Pb(II) detection ” – 11 th International Conference On Physics Of Advanced Materials (ICPAM-11) – 8 – 14 Septembrie, 2016, Cluj-Napoca, Romania Book of abstracts, pg 294	Lidia Magerusan, Crina Socaci, Florina Pogacean, Maria Coros, Marcela-Corina Rosu, Stela Pruneanu, Ioan Ovidiu Pana, Cristian Leostean	2016	
19	„Screen-printed electrodes modified with graphene for heavy metal ion detection” – 11 th International Conference On Physics Of Advanced Materials (ICPAM-11) – 8 – 14 Septembrie, 2016, Cluj-Napoca, Romania Book of abstracts, pg 296	Marcela-Corina Rosu, Lidia Magerusan, Crina Socaci, Florina Pogacean, Maria Coros, Stela Pruneanu	2016	
20	“Gold and screen-printed electrodes modified with N-doped ehaviou nanocomposite with applicability in heavy metal ion detection “ – 21 st National Conference “Progress in Cryogenics and Isotopes Separation – 18-21 octombrie 2016, Călimanești-Căciulata, Valcea, România Book of abstracts, pg 94, ISBN 978-606-8840-00-0	Lidia Magerusan, Crina Socaci, Maria Coros, Florina Pogacean, Marcela-Corina Rosu, Stela Pruneanu	2016	
21	“Highly ordered Iron Phthalocyanine (FePc) Nanometer-Sized Layers Deposited On Si (111) 7×7 By Molecular Beam Epitaxy”, IC-ANMBES 2016, 29 iunie- 1 iulie, Brasov, Romania, Book of abstracts, pg 86, ISSN 2360-3461	D. Marconi, A. Colniță B. Cozar I. Turcu	2016	
22	“The Use of Nanoimprint Lithography for the Fabrication of High-Quality Nanostructured Surfaces” 11 th International Conference On Physics Of Advanced Materials (ICPAM-11), 8 septembrie – 14 septembrie 2016, Cluj-Napoca, Romania, Book of Abstracts, pg. 348.	Alia Colniță, Bogdan Cozar, Diana Speranța Bogdan, Daniel Marconi, Ioan Turcu	2016	
23	„DFT investigation of SubPC migration on metallic surface” – IC-ANMBES 2016, 29 iunie – 1 iulie 2016, Brașov, Romania, Book of abstracts, pg 135, ISSN 2360-3461	Luiza Buimaga-Iarinca, Cristian Morari	2016	
24	„Electronic and transport properties of ruthenium-terpyridine as molecular device” – International Conference on Physics of Advanced Materials, ICPAM11, 7-14 septembrie 2016, Cluj-Napoca, Romania, Book of abstracts, pg 280,	Cristian Morari, Luiza Buimaga-Iarinca, Sorin Melinte, Gian-Marco Rignanese	2016	
25	“Spectroscopic Investigation Of Iron Phthalocyanine (FePc) Molecular Layers Deposited On Au/Si” IC-ANMBES 2016, 29 iunie- 1 iulie, Brasov, Romania	Bogdan Cozar, Daniel Marconi, Alia Colniță, Ioan Turcu	2016	
26	“Metallic Nanostructured Pattern for S-functionalization” 14 th National Conference of Biophysics 2 – 4 June 2016, Cluj-Napoca, Romania Book of abstracts, pg 67, ISSN 2248-0749	Nicoleta Tosa, Lucian Barbu-Tudoran, Ioan Bratu	2016	
27	„Metallic Micro- and Nanostructured Materials as Supporting Electrodes for Biomolecular Spectroscopy”, IC-ANMBES 2016, 29 iunie- 1 iulie, Brasov, Romania, Book of abstracts, pg 61, ISSN 2360-3461 - prezentare orala	Nicoleta Tosa, Alexandra Falamas, Cristian Tudoran, Lucian Barbu Tudoran, and Valer Tosa	2016	
28	“Metallic micro-/nanostructured material for electrodes patterned by direct laser writing” 11 th International Conference on Physics of Advanced Materials, September 8-14, 2016, Cluj-Napoca, Romania, Book of abstracts, pg 195 - prezentare orala	Nicoleta Tosa, Lucian Barbu-Tudoran, Alexandra Falamas, Cristian Tudoran, Anamaria Mihaela Gherman, Gabriel Rusu and Valer Tosa	2016	
29	“The influence of Eu ions on the properties of Fe ₃ O ₄ – TiO ₂ composite nanoparticles”, Procc. 16 th International Balkan Workshop on Applied Physics, IBWAP 2016, 7-9 July,	D.T. Silipas, M. Stefan, D. Toloman, A. Popa, C. Leostean, S. Gutoiu,	2016	

	Constanta, Romania, pag. 66	O. Pana		
30	"Gd-doped TiO ₂ nanoparticles with enhanced photocatalytic activity", 16 th International Balkan Workshop on Applied Physics, Procc. IBWAP 2016, 7-9 July, Constanta, Romania, pag. 59	D. Toloman, M. Stefan, A. Popa, D.T. Silipas, O. Pana	2016	
31	"Novel single and multicore magnetic nanoparticles doped with rare earth metals", 7 th Szeged International Workshop on Advances in Nanoscience (SIWAN7), Szeged, Ungaria, Book of Abstracts, p. 79	Anca Petran, Monica Cîrcu, Alexander Bunge, Alexandrina Nan, Teodora Radu, Rodica Turcu	2016	
32	"High magnetic moment superparamagnetic microspheres in water suspension: structure, magnetic and magnetorheological properties", 7 th Szeged International Workshop on Advances in Nanoscience (SIWAN7), Szeged, Ungaria, Book of Abstracts, p. 45	Corina Vasilescu, Izabell Crăciunescu, Daniela Susan-Resiga, Oana Marinică, Tibor Boros, Tünde Borbáth, Elena Chitanu, Mirela Codescu, Vlad Socoliuc, István Borbáth, Rodica Turcu, Ladislau Vékás	2016	
33	"Synthesis and characterization of high magnetization magnetic clusters", NanoTech Poland, International Conference and Exhibition, 31 May-3 June, Poznan, Poland, Book of Abstracts, p. 186	Anca Petran, Alexandrina Nan, Rodica Turcu	2016	
34	"New magnetite core-shell nanoparticles for biomedical applications", NanoTech Poland, International Conference and Exhibition, 31 May-3 June, Poznan, Poland, Book of Abstracts, p. 169	Alexander Bunge, Teodora Radu, Alexandrina Nan, Rodica Turcu	2016	
35	"New core-shell magnetic nanoparticles covered with polyvinylimidazole and their capacity of encapsulating rare earth metals", NanoTech Poland, International Conference and Exhibition, 31 May-3 June, Poznan, Poland, Book of Abstracts, p. 170	Monica Cîrcu, Alexandrina Nan, Rodica Turcu	2016	
36	"Magnetic Iron Oxide (Fe ₃ O ₄) Nanoparticles from Agro-Wastes for Removal of Antibiotic Pollutants from Waters", IC-ANMBES 2016, 29 iunie- 1 iulie, Brasov, Romania, Book of abstracts, pg 84, ISSN 2360-3461	M. Stan, I. Lung, M.L. Soran, C. Leostean, T.D. Silipas, S.A. Porav	2016	
37	"Application of Magnetite Nanoparticles Synthesized Using Agricultural Sources for Removal of Lanasy Red Dye", IC-ANMBES 2016, 29 iunie- 1 iulie, Brasov, Romania, Book of abstracts, pg 85, ISSN 2360-3461	I. Lung, M. Stan, O. Opris, M.L. Soran, C. Leostean, F. Copaciu, S.A. Porav	2016	
38	(Sub)ehaviours relaxation processes in nucleic acids constituents and in DNA molecules: a Raman and surface-enhanced Raman spectroscopy assessment, <i>International Conference on Analytical and Nanoanalytical Methods for Biomedical and Environmental Sciences IC-ANMBES 2016</i> , Brasov, Romania, June 29 – July 1, 2016, Book of Abstracts, p. 100.	C. M. Muntean, I. Bratu, C. Tripon, N. Dina	2016	
39	NMR relaxation study of Zidovudine – HSA interaction, <i>CNB 2016</i> , 2-4 iunie, Cluj-Napoca, Book of abstracts, pg 60, ISSN 2248-0749	A. Pîrnău, M. Bogdan, C. G. Floare, M. Mic, S. Neamțu	2016	
40	NMR study on the Low-Affinity Interaction of Human Serum Albumin with Zidovudine, <i>IC-ANMBES 2016</i> , 29 iunie- 1 iulie, Brasov, Romania, Book of abstracts, pg 102, ISSN 2360-3461	A. Pîrnău, M. Bogdan, C. G. Floare, M. Mic, S. Neamțu	2016	
41	Comparative antioxidant and prooxidant activities of five Plantago species, <i>IC-ANMBES 2016</i> , p. 120, Brasov, 29 Iunie-1 Iulie, ISSN 2360-3461	Anca D. Farcaș, Augustin Moț, Vlad Toma, Laurian Vlase, Silvia Neamțu, Marcel	2016	

		Pârvu		
42	In vitro and In vivo antioxidant potential of <i>Plantago arenaria</i> , <i>International Conference of RSCB</i> , p. 19, Oradea, 8-12 June, 2016, ISSN 1584-5532	Anca D. Farcaș, Alina E. Pârvu, Vlad A. Toma, Augustin C. Moț, Ioana Roman, Marcel Pârvu	2016	
43	Phenolic Profile Analysis, Pro-oxidant Antioxidant Activity Reactivity and <i>Plantago arenaria</i> and <i>Plantago major</i> Extracts, <i>National Conference of Biophysics</i> , p. 78, Cluj-Napoca, 2-4 June, 2016, ISSN 2248-0749	Anca D. Farcaș, Augustin C. Moț, Vlad A. Toma, Silvia Neamțu, Marcel Pârvu	2016	
44	Evaluation of antioxidant properties and biological activities of several <i>plantago</i> hidroalcoholic extracts, <i>The 15th international symposium –Prospect for the 3rd millennium agriculture</i> , p. 463, 29.09-1.10 2016, Cluj-Napoca, ISSN 2392-6937	Anca D. Farcaș, Augustin C. Moț, Vlad A. Toma, Alina E. Pârvu, Ioana Roman, Silvia Neamțu, Marcel Pârvu	2016	
45	Cellular and biochemical coordinates related to CA3 hippocampal field in repeated restraint stress, <i>International Conference of RSCB</i> , p. 22, Oradea, 8-12 June, 2016, ISSN 1584-5532	Vlad A. Toma, Anca D. Farcaș, Alina Rusu, Radu Silaghi-Dumitrescu, Marcel Pârvu, Ioana Roman	2016	
46	Antioxidant activity and phytochemical elements of five <i>Allium</i> species, <i>The 15th international symposium –Prospect for the 3rd millennium agriculture</i> , p. 482, 29.09-1.10 2016, Cluj-Napoca, ISSN 2392-6937	Vlad A. Toma, Augustin C. Moț, Anca D. Farcaș, Silvia Neamțu, Loredana Soran, Ildiko Lung, Radu Silaghi-Dumitrescu, Marcel Pârvu	2016	
47	Supramolecular Systems for Drug Delivery Applications, <i>The IV-th Edition of International Conference on Analytical and Nanoanalytical Methods for Biomedical and Environmental Sciences</i> , 29 iunie -1 iulie 2016, Brașov, Romania, Book of Abstracts IC-ANMBES 2016, ISSN 2360-3461. Pg. 142	C. Filip, C. Socaci, F.A. Martin, I.-G. Grosu, I.E. Kacso, M. Miclăuș, M.L. Golban, X. Filip	2016	
48	NMR Crystallography Techniques for structural Characterization of Pharmaceutical compounds from Powders, <i>The 15th European Powder Diffraction Conference (EPDIC15)</i> , Iunie 12-15, Bari, Italia, Book of Abstracts, ISBN 978888080203.7, pg. 210	M. Miclaus, I. Grosu, X. Filip, F. Martin, C. Filip	2016	
49	„Validation of combined SPE and GC/MS method for analysis of organophosphorus flame retardants in aqueous samples”, 43rd Conference of Slovak Society of Chemical Engineering – SSCHE 2016, May 23-27, Tatranské Matliare, Slovakia.	Ioana-Coralia Feher, Veronica Floare-Avram, Olivian Marincas, Alina Magdas, Zaharie Moldovan	2016	
50	“Wastewater decontamination using highly porous Metal Organic Framework (MOF) and nanostructured carbon materials”, IC-ANMBES 2016, 29 iunie- 1 iulie, Brasov, Romania, Book of abstracts, pg 157, ISSN 2360-3461	C. Voica, D. Lazar, G. Blanita, A. Magdas	2016	
51	„Studies on Fe ₃ O ₄ -SnO ₂ composite nanoparticles”, 16 th International Balkan Workshop on Applied Physics, 7-9 iulie 2016, Constanta, Romania, pag. 59	M. Stefan O. Pana, C. Leostean, D. Toloman, A. Popa, S. Gutoiu, S. Macavei, F. Pogacean, L. Barbu-Tudoran	2016	
52	„Structural, morphological and optical properties of SnO ₂ -TiO ₂ nanocomposite materials”, 16 th International Balkan Workshop on Applied Physics, 7-9 iulie 2016, Constanta, Romania, pag 61	C. Leostean, M. Stefan, O. Pana, A. Popa, D. Toloman, S. Macavei, R. Suciuc, D. Silipas,	2016	

53	„Interface charge/spin transfer in Fe ₃ O ₄ -SnO ₂ core-shell nanoparticles”, 11th International Conference on Physics of Advanced Materials, 8-14 septembrie 2016, Cluj-Napoca, Romania, p. 103	M. Stefan, O. Pana, C. Leostean, A. Popa, D. Toloman, S. Gutoiu, S. Macavei	2016	
54	„SnO ₂ -TiO ₂ nanocomposites for lithium ion batteries, 11th International Conference on Physics of Advanced Materials”, 8-14 septembrie 2016, Cluj-Napoca, Romania, p. 106	C. Leostean, M. Stefan, O. Pana, A. Popa, D. Toloman, S. Macavei, R. Suci, D.T. Silipas	2016	
55	“Magnetic behaviour of CoPt@Fe ₃ O ₄ chemically synthesized hard/soft magnetic nanoparticles”, IBWAP 2016 (7-9, iulie, 2016) Constanta, Book of abstracts, pg. 67, ISSN 2501-9058	S Gutoiu, M L Soran, C Leostean, M V Stefan, G S Macavei, O. Pana	2016	
56	„Catalytic activity evaluation of MnO ₂ nanoparticles obtained with plant extracts”, 15 th International Symposium – Prospects for the 3rd Millennium Agriculture”, 29 septembrie – 01 octombrie 2016, Cluj-Napoca, Romania	O. Oprea, M.L. Soran, I. Lung, M. Stan, I. Kacso, D. Lazăr, C. Leostean, O. Pană, A.S. Porav, T.D. Silipaș	2016	
57	„Synthesis and characterization of nanoparticles based on iron and manganese oxides”, 16 th International Balkan Workshop on Applied Physics and Materials Science (IBWAP 2016), 7-9 iulie, Constanța, Romania.	I. Lung, M.L. Soran, M. Stan, O. Oprea, I. Kacso, C. Leostean, M. Ștefan, O. Pană	2016	
58	“XRD, Raman, photoluminescence and SEM studies of molybdate-lead glasses and ceramics glass”, 16 th International Balkan Workshop on Applied Physics, Proceedings, 7 – 9 Iulie, Constanța, România, 2016, pg. 29	R. – C. Suci, N. Aldea, M. Rada, S. Rada, E. Culea, A. Biriș, I. Marian	2016	
59	“Study on characteristic of bonding and structural changes in molybdenum-lead-lead dioxide glasses and vitroceramics”, 16 th International Balkan Workshop on Applied Physics, Proceedings, 7 – 9 Iulie, Constanța, România, 2016, pg.62	M. Zagrai, N. Dura, M. E. Pică, M. Rada, E. Culea, S. Rada, R. – C. Suci, N. Aldea	2016	
60	“Structural, optical and electrochemical behaviour of antimony (III) oxide – lead – lead dioxide glasses and vitroceramics”, Cryogenics and Isotopes Separation”, Calimănești – Valcea, 19-21 October 2016, pg 9.	S. Rada, M. Zagrai, M. Rada, N. Aldea, L. Magerusan, S. Macavei, A. Bot, E. Culea	2016	
61	„Catalytic reactor for sulfuric acid conversion to sulfur dioxide, A XXI-a Conferință Progrese în Cryogenie și Separați Izotopice”, Călimănești-Căciulata, Romania, 19 – 21 Oct. , pag. 21 – 22	Ancuța Balla, Damian Axente, Cristina Marcu	2016	

4.2.3. Lucrări publicate în alte publicații relevante:

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

4.2.4. Studii, Rapoarte, Documente de fundamentare sau monitorizare care: **a) au stat la baza unor politici sau decizii publice:**

Tip document	Nr.total	Publicat în:
Hotărâre de Guvern		
Lege		
Ordin ministru		

Decizie președinte		
Standard		
Altele (se vor preciza)		

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

Tip eveniment	Nr. Apariții	Nume eveniment:
web-site		
Emisiuni TV	4	TVR Cluj – ȘTIINȚA ȘI CUNOAȘTERE , serial 4 episoade: <i>Fizica-Realitatea-Conștiința</i>
Emisiuni radio		
Presă scrisă/electronică		
Cărți		
Reviste	4	<i>Tehnologii avansate pentru producere, recuperare și stocare de energie</i> , Market Watch, nr 183, aprilie 2016 <i>INCDTIM Cluj Napoca- trecut, prezent și viitor în participarea la experimentul ATLAS de la CERN Geneva</i> , Market Watch, nr 186, iulie-august 2016 <i>INCDTIM Cluj-Napoca și tehnologiile biomoleculare emergente ce țintesc aplicații biomedicale</i> , Market Watch, nr. 188, octombrie 2016 <i>INCDTIM Cluj-Napoca, în avangarda eficientizării sistemelor de producție energie alternativă</i> , Market Watch, nr189, noiembrie 2016
Altele (se vor preciza)	1	Seria de prezentari publice "Cafeneaua Științei" cu prezentarea "Lumea fara petrol- sansa energiilor alternative" 25.10.2016 https://www.facebook.com/cafescicluj/

593.11.10 **Tehnologii, procedee, produse informatice, rețele, formule, metode și altele asemenea:**

Tip	2016
Tehnologii	1
Prototip	1
Produse informatice	1
Rețete	5
Proiecte tehnice	4
Metode	21
Altele asemenea: model experimental	11
Alte asemenea: produse finite (compusi marcați izotopic)	3
Alte asemenea: produse (baze de date)	2
Alte asemenea: produse (materiale noi)	16
Alte asemenea: produse finite (componente ale <i>Tile Calorimeter</i> la detectorul ATLAS, CERN Geneva)	2
Alte asemenea: protocoale experimentale	2
Alte asemenea: schema de realizare	1

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	6	A/00311/ 04.05.2016	Magerusan Lidia, Socaci Crina, Coros Maria, Rosu Marcela-Corina, Pogacean Florina, Pruneanu Stela-Maria	Procedeu de preparare și aplicare în detecția electrochimică a unui nou material nanocompozit pe bază de chitosan și grafene dopate cu atomi de azot
		Nr. A/00553 / 02.08.2016	Surducan Emanoil, Surducan Vasile, Neamtu Camelia	Antenă de bandă largă și antenă redresoare realizată cu această antenă pentru colectarea electrosmogului și conversia lui în energie electrică
		Nr. A/00654 / 16.09.2016	Surducan Vasile, Surducan Emanoil	Automat mobil pentru micro-irigare cu măsurarea umidității solului și funcționare autonomă
		Nr. A/00853/ 18.11.2016	Surducan Emanoil, Surducan Vasile, Neamtu Camelia (RO); Angela Limare, Erika DiGiuseppe (FR)	Dispozitiv de încălzire cu microunde
		Nr. A/00679 / 27.09.2016	Alexandrina Nan, Rodica Turcu	Nanoparticule de magnetită stabilizate cu acid (n-fosfonometil)imidodiacetic și dopate cu ioni ai pământurilor rare
			Cristian Tudoran, Maria Ștefan, Nicoleta Toșa, Ovidiu I. Pană, Sergiu Macavei	Nanoplas-1: Instalație automată pentru purificarea avansată a apei potabile
EPO				
USPTO				

4.4. Structura de personal:

Personal CD (Nr.)	2016
Total personal	223
Total personal CD	170
cu studii superioare	157
cu doctorat	108
doctoranzi	29

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

Nr.	Nume și prenume	Grad	Funcția	Echivalent normă întreagă	Anul angajării	Nr. Ore 2016
1	Bot Adrian	CS2	Director General	0.27	05.08.1974	537.48
2	Filip Claudiu	CS1	Director Stiintific	0.30	01.10.1992	599.28

3	Popeneciu Gabriel	CS2	Director Tehnic	0.30	08.09.1982	598.50
4	Silipas Teofil	CS2		0.55	01.09.1975	1,110.04
5	Albert Stefan	IDT2		0.54	01.10.2001	1,102.61
6	Farcas Felix	IDT2		0.24	01.11.2006	485.23
7	Nagy Jefte	Tehnician		0.28	01/09/2012	576.44
8	Trusca Mihail Radu	IDT2		0.53	01.11.2006	1,064.04
9	Gergely Stefan	IDT1	Director CIT	0.41	01.11.2006	820.91
10	Balazs Zoltan	CS		0.75	01.05.2001	1,527.99
11	Belean Bogdan	CS2		0.45	01.07.2011	903.87
12	Blanita Gabriela	CS2		0.42	01.12.2007	846.98
13	Coldea Ioan	IDT1		0.50	10.09.1982	1,016.16
14	Cristea Gabriela	CS3		0.44	15.12.2000	886.20
15	Covaciu Florina	CS		0.57	01.05.2001	1,163.71
16	Curean Ioana	Tehnician		0.46	30.09.1989	921.17
17	Dan Monica	CS		0.43	15.06.2005	866.57
18	Dehelean Adriana	CS3		0.56	15.12.2000	1,123.80
19	Feher Coralia	CS		0.48	01.12.2007	979.06
20	Floare Avram Cornelia	CS3		0.50	01.11.2006	1,011.48
21	Grosan Ana Camelia	CS2		0.52	01.11.2006	1,047.65
22	Lazar Mihaiela	CS1		0.32	21.02.2006	651.18
23	Magdas Dana	CS1	Sef Departament	0.32	01.11.2006	655.24
24	Marginean Ioan	Tehnician		0.73	01.09.1976	1,474.30
25	Marincas Olivian	CS		0.56	01.11.2006	1,126.37
26	Mihet Maria	CS3		0.32	01.11.2006	644.48
27	Mirel Valentin	IDT1		0.49	01.09.1981	993.97
28	Misan Ioan	IDT1	Sef Atelier	0.37	04.08.1977	754.42
29	Oltean Sorin	Tehnician		0.40	01.12.2010	804.64
30	Petrica Nicoleta	Tehnician		0.34	15.09.1988	687.92
31	Pogacian Sergiu	IDT1		0.56	01.01.2011	1,126.36
32	Puscas Romulus	CS		0.58	24.09.1990	1,173.59
33	Radu Stelian	Tehnician		0.38	01.02.2008	769.80
34	Voica Cezara	CS3		0.43	01.02.2006	861.70
35	Vulcu Adriana	CS3		0.47	01.12.2007	948.00
36	Zotoiu Dan	Tehnician		0.35	05.01.1981	707.51
37	Bunge Alexander	CS3		0.53	03/03/2014	1,080.00
38	Ciupe Sorina	Tehnician		0.41	01.09.1980	837.32
39	Circu Monica Violeta	CS3		0.54	26/02/2014	1,085.76
40	Craciunescu Izabell	CS3		0.58	01.09.2000	1,177.47
41	Groza Maria	Tehnician		0.57	01.07.2006	1,147.88
42	Gutoiu Simona	CS3		0.54	01.12.2011	1,083.54
43	Kacso Irina	CS3		0.60	01.02.2006	1,215.64
44	Leostean Cristian	CS3		0.51	01.11.2006	1,035.76
45	Lung Ildiko	CS3		0.71	05.01.2004	1,439.38
46	Macavei Gabriel	IDT1		0.61	09.09.1985	1,226.14
47	Macavei Ildiko	Tehnician		0.58	05/06/2012	1,180.35
48	Nan Alexandrina	CS2		0.52	01.01.2005	1,050.80
49	Opris Ocsana	CS3		0.70	06/03/2013	1,418.97
50	Pana Ioan O.	CS1	Sef Departament	0.36	01.09.1978	728.81
51	Petran Anca Cristina	CS3		0.54	01/04/2012	1,085.80
52	Pop Mircea	CS		0.75	01.12.2007	1,527.99
53	Popa Adriana	CS2		0.61	01.02.2005	1,226.01
54	Rada Marius	IDT2		0.62	01.01.2012	1,259.06
55	Radu Maria Teodora	CS2		0.64	01/04/2015	1,288.87
56	Raita Laura	CS2		0.59	01.05.2001	1,187.01
57	Soran Maria Loredana	CS2		0.60	01.10.2004	1,218.34
58	Stan Manuela	CS3		0.72	15.12.2000	1,456.88
59	Stefan Maria	CS2		0.61	22.11.2010	1,226.31
60	Stegarescu Olimpia	CS3		0.41	07/01/2013	831.33

61	Suciu Ramona	CS3		0.72	01.02.2008	1,447.99
62	Toloman Dana	CS2		0.58	01.01.2001	1,164.51
63	Turcu Rodica	CS1		0.43	05.08.1980	875.43
64	Bende Attila	CS1		0.37	01.06.2003	756.82
65	Bilc Daniel	CS1		0.53	01.10.2011	1,079.48
66	Bogdan Diana	CS2		0.51	21.09.2005	1,023.34
67	Bojan Marcel	Tehnician		0.36	01/09/2012	731.19
68	Bratfalean Radu	CS2		0.75	01.03.2006	1,528.00
69	Bugeac Carmen	Tehnician		0.21	01.11.2006	430.34
70	Buimaga Iarinca Luiza	CS3		0.41	01.02.2006	826.11
71	Calborean Adrian	CS2		0.42	01.05.2011	843.88
72	Colnita Alia	CS		0.40	01/09/2012	814.18
73	Cozar Ionut	CS3		0.53	01.10.2011	1,063.78
74	Dadarlat Dorin	CS1		0.38	01.08.1977	766.53
75	Dina Nicoleta	CS3		0.16	01/04/2015	330.18
76	Farcas Anca	AC		0.70	13/05/2014	1,408.00
77	Farcas Alexandra	AC		0.04	12/01/2016	90.05
78	Falamas Alexandra	CS3		0.04	03/06/2013	84.33
79	Filip Xenia	CS2		0.58	01.02.1995	1,165.67
80	Floare Calin	CS3		0.45	24.11.1997	915.13
81	Gherman Ana Maria Mihaela	AC		0.00	02/12/2015	9.88
82	Gherman Ana Maria Raluca	AC		0.06	18/07/2016	128.89
83	Grosu Ioana	CS3		0.47	01/07/2011	941.41
84	Kiss Gelert	AC		0.03	02/12/2015	61.95
85	Kovacs Katalin	CS3		0.01	01.12.2007	22.25
86	Janosi Lorant	CS1		0.42	13/01/2013	849.20
87	Marconi Daniel	CS3		0.48	01/09/2012	976.77
88	Martin Flavia Adina	CS3		0.27	03/03/2014	545.47
89	Mic Mihaela	CS3		0.31	01.12.2007	618.29
90	Miclaus Maria	CS		0.50	03/03/2014	1,015.84
91	Morari Ioan Cristian	CS1		0.38	01.12.1996	777.59
92	Mot Catalin	CS3		0.05	19/10/2016	108.08
93	Muntean Cristina	CS1		0.25	01.10.1981	508.61
94	Neamtu Camelia	CS2		0.66	22.09.1981	1,338.00
95	Neamtu Silvia	CS3		0.54	01.11.1980	1,085.26
96	Oancea Marius Adrian	AC		0.45	04/12/2015	910.88
97	Pirnau Adrian	CS2		0.47	01.11.2006	941.83
98	Streza Mihaela	CS2		0.36	01.02.2005	737.15
99	Surducan Emanoil	CS2		0.52	09.09.1982	1,060.60
100	Surducan Vasile	IDT1		0.51	03.08.1982	1,024.15
101	Toma Vlad	AC		0.70	13/05/2014	1,408.00
102	Tosa Nicoleta	CS2		0.40	11.09.2006	817.63
103	Tripon Carmen	CS3		0.41	05.01.2004	823.74
104	Tudoran Cristian	IDT2		0.57	01.11.2007	1,144.84
105	Turcu Ioan	CS1	Sef Departament	0.33	05.08.1980	672.36
106	Zarbo Liviu	CS2		0.51	04/11/2014	1,028.04
107	Balla Ancuta	CS		0.36	01.11.2006	718.69
108	Bot Razvan	Tehnician		0.33	02/07/2012	667.48
109	Bugeac Stefan	IDT		0.51	21/01/2013	1,024.43
110	Coros Maria	CS3		0.37	01/06/2012	750.48
111	Csete Istvan	Tehnician		0.29	01/04/2015	591.29
112	Gligan Mihai	IDT1	Sef Departament	0.33	16.09.1980	675.51
113	Magerusan Lidia	CS3		0.42	03/03/2014	846.61
114	Oarga Vasile	Tehnician		0.33	05.03.1982	670.48
115	Oprea Cristinel	Tehnician		0.33	07/01/2013	669.78
116	Patras Silviu Orlando	Tehnician		0.33	07/01/2013	671.16
117	Pogacean Florina	CS3		0.37	01.11.2006	755.12
118	Pop Ligia	Tehnician		0.35	01.10.1981	708.30
119	Pruneanu Stela	CS1		0.38	11.08.2008	762.29
120	Rosu Marcela	CS3		0.42	01.12.2007	847.60

121	Socaci Crina	CS2		0.29	01/01/2011	585.00
122	Szucs Balazs Jozsef	IDT2		0.42	21/01/2013	843.67
123	Toadere Florin	CS		0.19	01.05.2001	383.99
124	Turza Alexandru	AC		0.51	02/12/2015	1,022.74
125	Varodi Codruta	CS		0.48	01.12.2007	965.35
126	Crisan Dorel	Muncitor		0.36	19.04.1979	734.37
127	Georgiu Petru	Muncitor		0.35	24.02.1981	717.13
128	Gyorgy Attila	Muncitor		0.35	09/07/2012	706.15
129	Krisan Varga Ioan	Muncitor		0.40	01.02.2012	813.29
130	Nilos Mircea	Muncitor		0.38	07.01.2008	777.68
131	Orasan Florin Ioan	Muncitor		0.39	13/02/2015	781.62
132	Orban Grigore	Muncitor		0.37	16.07.2007	740.61
133	Pirtoc Ovidiu Cosmin	Muncitor		0.38	01/06/2012	762.12
134	Pop Eugen	Maistru		0.33	06.08.1971	659.38
135	Scarlat Adrian	Muncitor		0.34	01.10.1974	694.42
136	Stanciu Laurentiu	Muncitor		0.41	19/11/2015	839.83
137	Szalma Zsolt	Muncitor		0.41	01.12.2007	823.32
138	Topan Ioan	Muncitor		0.37	01/03/2015	747.63
139	Tripon Corneliu	Muncitor		0.36	20.07.2007	727.98
140	Vadan Grigore	Muncitor		0.16	03.09.1974	329.00
141	Barbu Tudoran Lucian	CS2		0.12	20/07/2015	250.16
142	Bruj Emil	IDT3		0.37	20/05/2016	756.00
143	Iordache Coca Angela	CS2		0.08	21.11.2016	160.58
144	Nadas Iuliu Adrian	IDT3		0.29	01/06/2016	593.92
145	Pop Ionel Radu	IDT		0.32	01/07/2016	652.41
146	Misan Alexandru Stefan	Tehnician		0.36	01/09/2015	732.14
147	Scheul Morariu Ancuta Teodora	IDT3		0.45	08/02/2016	905.80
148	Suciu Maria	CS3		0.24	19/10/2015	495.86
149	Tripon Septimiu Casian	Tehnician		0.18	19/10/2015	371.42
150	Porav Alin Sebastian	AC		0.15	19/10/2015	307.13
151	Rada Simona	CS1		0.13	20/09/2016	272.01
152	Rednic Vasile	IDT2		0.42	26/05/2016	853.34
153	Rosca Gabriel Aurelian	Tehnician		0.20	02/12/2015	402.31

* 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, fotografiile, 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.	INSTALATIE DE CLIMATIZARE 24000BTU	3/6/2016	7,428.00	PN16-30 01 01 FILIP CLAUDIU	7,428.00	nu este cazul
2.	INSTALATIE DE CONDITIONARE AER FUJITSU 30000BTU	22/11/16	8,352.00	PN16-30 01 01 FILIP CLAUDIU	8,352.00	nu este cazul
3	SOFT SPECIALIZAT LABVIEW PROFESSIONAL DEV SYSTEM	31/05/16	30,230.12	PN16-30 01 01 FILIP CLAUDIU	30,230.12	4h / zi
4	LIC.MICROSOFT DYNAMICS NAV 2016-MODUL SALARIZARE	29/11/16	57,156.00	PN16-30 01 01 FILIP CLAUDIU	57,156.00	utilizare continua
5	CALC.HP PRODESK 490+MONITOR	21/07/16	4,328.76	PN16-30 01 01 FILIP CLAUDIU	4,328.76	8h / zi
6	CALCULATOR HP PRODESK 600 G2 MT+MONITOR+OFFICE	25/11/16	15,641.46	PN16-30 01 01 FILIP CLAUDIU	15,641.46	8h / zi
7	CALC.HP PRODESK 600 G2 MT + MONITOR + OFFICE	25/11/16	10,427.64	PN16-30 01 01 FILIP CLAUDIU	10,427.64	8h / zi
8	MICROSCOP INVERSAT, MODEL IN200TA-P	18/11/16	10,393.20	PN16-30 01 01 FILIP CLAUDIU	10,393.20	2h / zi
9	STATIE GRAFICA HP Z640+MONITOR HP Z27	3/8/2016	13,673.88	PN16-30 01 01 FILIP CLAUDIU	13,673.88	4h / zi

10	XEROX WORKCENTRE 6655X	11/11/2016	7,470.70	PN16-30 01 01 FILIP CLAUDIU	7,470.70	nu este cazul
11	XEROX WORKCENTRE 5945i MULTIFUNCTIONAL A3	25/11/16	21,067.02	PN16-30 01 01 FILIP CLAUDIU	21,067.02	nu este cazul
12	MASINA SPALAT STICLARIE LABORATOR MIELE PG8583	24/11/16	39,510.00	PN16-30 01 01 FILIP CLAUDIU	39,510.00	1h / zi
13	MODUL SANITAR CU CHIUVEA KOTTERMANN	5/12/2016	31,633.20	PN16-30 01 01 FILIP CLAUDIU	31,633.20	nu este cazul
14	CALC. HP PRODESK 600 G2MT CU MONITOR SI OFFICE	28/10/16	7,577.74	PN16-30 01 02 BOT ADRIAN	7,577.74	8h / zi
15	CALC. HP PRODESK 600 G2MT CU MONITOR SI OFFICE	28/10/16	7,577.73	PN16-30 01 02 BOT	7,577.73	8h / zi
16	SOFTWARE ANY PDF TO DWG CONVERTER	18/10/16	1,209.60	PN16-30 01 02 BOT	1,209.60	8h / zi
17	GRUP ELECTROGEN CU MOTOR STIRLING	6/5/2016	133,838.66	PN16-30 01 02 BOT	133,838.66	4h / zi
18	LAPTOP APPLE MACBOOK PRO COD	20/09/16	14,155.20	PN16-30 01 02 BOT	14,155.20	8h / zi
19	SOFT WINDOWS PT SERVERE	22/04/16	7,970.09	PN16-30 01 02 BOT	7,970.09	8h / zi
20	LIOFILIZATOR DE LABORATOR ALPHA 2-4 LD PLUS	25/11/16	93,432.47	PN16-30 01 02 BOT	93,432.47	2h / zi
21	ECHIPAMENT IT FIREWALL	5/12/2016	131,600.40	PN16-30 01 02 BOT	131,600.40	utilizare continua
22	SISTEM DE MASURA FREZA	29/11/16	6,264.00	PN16-30 01 02 BOT	6,264.00	8h / zi
23	SISTEM DE MASURA STRUNG	29/11/16	6,308.40	PN16-30 01 02 BOT	6,308.40	8h / zi
24	SOFT OFFICE PRO + DEV SL	29/11/16	4,716.98	PN16-30 01 02 BOT	4,716.98	8h / zi
25	INREGISTRATOR + MODUL	10/11/2016	5,160.00	PN16-30 01 02 BOT	5,160.00	4h / zi
26	MULTIMETRU DIGITAL 6,1/2 DIGIT	25/11/16	5,195.00	PN16-30 01 02 BOT	5,195.00	4h / zi
27	FREZA MODERNIZARE	6/12/2016	37,822.68	PN16-30 01 04 LAZAR DIANA	37,822.68	8h / zi
28	CALC.HP PRODESK 490G3 MICROTOWER+MON.HP E2+ SOFT	24/05/16	17,077.11	PN16-30 01 04 LAZAR DIANA	17,077.11	8h / zi
29	CALC.HP PRODESK 400 G3 MICROTOWER+ MONITOR HPE23	24/05/16	3,704.59	PN16-30 01 04 LAZAR DIANA	3,704.59	8h / zi
30	RACITOR CU APA (CHILLERS) H150-1000N	1/8/2016	15,182.40	PN16-30 01 04 LAZAR DIANA	15,182.40	utilizare continua
31	CONTAINER DE REACTIE (BOMBA DE DIGESTIE ACIDA+AC	25/11/16	23,756.40	PN16-30 02 01 TURCU IOAN	23,756.40	2h / zi
32	BAIE ULTRASONICA ELMASONIC P30H CU CAPAC SI COS	21/11/16	5,554.80	PN16-30 02 01 TURCU IOAN	5,554.80	1h / zi
33	INSTAL.CONDITIONARE A AERULUI FUJITSU 30000 MTU	14/11/16	8,352.00	PN16-30 02 01 TURCU IOAN	8,352.00	utilizare continua
34	PH-METRU S400-KIT METTLER TOLEDO	23/11/16	9,992.40	PN16-30 02 01 TURCU IOAN	9,992.40	2h / zi
35	SPECTROFOTOMETR JASCO V-750	2/12/2016	77,280.00	PN16-30 02 01 TURCU IOAN	77,280.00	5h / zi
36	LAPTOP HP ELITEBOOK 850 NOTEBOOK i7-6500+ OFFICE	28/11/16	6,890.38	PN16-30 02 01 TURCU IOAN	6,890.38	nu este cazul
37	LAPTOPLAPTOP HP ELITEBOOK 850 NOTEBOOK i7-6500+	28/11/16	6,890.38	PN16-30 02 01 TURCU IOAN	6,890.38	nu este cazul
38	LAPTOP HP ELITEBOOK 850 NOTEBOOK i7-6500+ OFFICE	28/11/16	13,780.76	PN16-30 02 01 TURCU IOAN	13,780.76	nu este cazul
39	LAPTOP HP ELITEBOOK 850 NOTEBOOK i7-6500+ OFFICE	28/11/16	6,890.37	PN16-30 02 01 TURCU IOAN	6,890.37	nu este cazul
40	LAPTOP HP ELITEBOOK 850 NOTEBOOK i7-6500+ OFFICE	28/11/16	13,780.76	PN16-30 02 01 TURCU IOAN	13,780.76	nu este cazul
41	LAPTOP HP ELITEBOOK 850 NOTEBOOK i7-6500+ OFFICE	28/11/16	6,890.37	PN16-30 02 01 TURCU IOAN	6,890.37	nu este cazul
42	SOURCEMETER CU TESTERE	26/05/16	26,208.14	PN16-30 02 01 TURCU IOAN	26,208.14	2h / zi
43	SPECTROMETRU PORTABIL CU ACCESORII	5/10/2016	156,000.00	PN16-30 02 01 TURCU IOAN	156,000.00	4h / zi
44	AGITATOR MAGNETIC CU 10 POZITII MS-M-10	26/07/16	6,318.00	PN16-30 02 02 RODICA TURCU	6,318.00	4h / zi
45	AGITATOR MAGNETIC CU INCALZIRE MR HEI TEC+ACCESO	26/07/16	3,786.00	PN16-30 02 02 RODICA TURCU	3,786.00	4h / zi
46	AGITATOR MAGNETIC CU INCALZIRE MR HEI TEC+ACCESO	19/10/16	3,786.00	PN16-30 02 02 RODICA TURCU	3,786.00	4h / zi
47	MANTA DE INCALZIRE CU AGITARE MAGNETICA 500 ML	19/10/16	5,233.06	PN16-30 02 02 RODICA TURCU	5,233.06	8h / zi
48	ROTOR UNGHIULAR FIX PT 24 MICROTUBURI	27/07/16	2,456.40	PN16-30 02 03 JANOSI LORANT	2,456.40	8h / zi
49	CELULA DE EFUZIE CU 4 SURSE	6/9/2016	75,361.24	PN16-30 02 03	75,361.24	2h / zi

	PT.MATER. ORGANICE			JANOSI LORANT		
50	SOFT WINDOWS PT SERVERE	30/05/16	7,147.36	PN16-30 02 03 JANOSI LORANT	7,147.36	nu este cazul
51	SUPORT ARTICULAT PENTRU APARATURA OPTICA	6/9/2016	17,354.36	PN16-30 02 03 JANOSI LORANT	17,354.36	8h / zi
52	POMPA PERISTALTICA MODEL HEL- FLOW PRECISION 01	24/11/16	14,190.53	PN16-30 02 03 JANOSI LORANT	14,190.53	8h / zi
53	POWERMETRU LASER GENTEC PT. MASURAREA ENERGIILOR	24/11/16	22,000.00	PN16-30 02 03 JANOSI LORANT	22,000.00	2h / zi
54	SERVER BLADE HPE PROLIANT BL460C GEN9	24/11/16	71,402.88	PN16-30 02 03 JANOSI LORANT	71,402.88	functionare continua
55	SERVER BLADE HPE PROLIANT BL460C GEN9	24/11/16	17,850.72	PN16-30 02 03 JANOSI LORANT	17,850.72	functionare continua
56	ANSAMBLU MOTOR REDUCTOR CU ENCODER HEDL 5540	24/11/16	17.451,93	PN16-30 02 03 JANOSI LORANT	17.451,93	functionare continua
57	ANSAMBLU MOTOR REDUCTOR CU ENCODER HEDL 9140	24/11/16	15,338.26	PN16-30 02 03 JANOSI LORANT	15,338.26	functionare continua
58	MANTALE DE INCALZIRE DE 100 ML	22/11/16	3,516.00	PN16-30 02 03 JANOSI LORANT	3,516.00	2h / zi
59	MANTALE DE INCALZIRE DE 250 ML	22/11/16	3,636.00	PN16-30 02 03 JANOSI LORANT	3,636.00	2h / zi
60	BALANTA ANALITICA KERN ABT 100-5M	30/05/16	10,610.80	PN16-30 02 04 MAGDAS ALINA	10,610.80	2 h/ zi
61	LAPTOP 2 IN 1 ASUS TRANSFORMER T100HA + OFFICE	1/6/2016	2,786.40	PN16-30 02 04 MAGDAS ALINA	2,786.40	nu este cazul
62	SOFT PRELUCRARI IBM SPSS STATISTICS BASE	24/11/16	37,900.80	PN16-30 02 04 MAGDAS ALINA	37,900.80	3h / zi
63	SPECTROFOTOMETRU SPECORD 250 PLUS	21/11/16	71,280.00	PN16-30 02 04 MAGDAS ALINA	71,280.00	6h / zi
64	POMPA HPLC, LC-20AD, SHIMADZU	7/11/2016	22,429.92	PN16-30 02 04 MAGDAS ALINA	22,429.92	8h / zi
65	LICENTA DIGITALA ORIGINPRO V2016	10/11/2016	31,876.80	PN16-30 02 04 MAGDAS ALINA	31,876.80	3h/zi
66	AGITATOR MAGNETIC CU INCALZIR,SENZOR TEMP	15/11/16	6,917.40	PN16-30 02 04 MAGDAS ALINA	6,917.40	2h/zi
67	APARAT ELECTROTHERMAL PT.DETER.PCT.DE TOPIRE	25/11/16	9,139.20	PN16-30 02 04 MAGDAS ALINA	9,139.20	2h / zi
68	COLOANA GAZ CROMATOGRAF RT-Q-BOND PLOT	14/11/16	3,086.14	PN16-30 02 04 MAGDAS ALINA	3,086.14	3h/zi
69	MULTIPARAMETRU MODEL 3010T(ELECTROD SP10T+SK10T)	25/11/16	6,000.00	PN16-30 02 04 MAGDAS ALINA	6,000.00	2h / zi
70	CALC.ATEX INTEL COREI5+ MONITOR DELL+OFFICE 2016	10/11/2016	10,331.98	PN16-30 02 04 MAGDAS ALINA	10,331.98	8h/zi
71	DESKTOP DELL VOSTRO 3650 MT+MONITOR DELL+OFFICE	14/11/16	12,213.60	PN16-30 02 04 MAGDAS ALINA	12,213.60	8h/zi
72	HP PRODESK 600 G2 MT i9-6500+ MONITOR+OFFICE	25/11/16	10,427.64	PN16-30 02 04 MAGDAS ALINA	10,427.64	8h/zi
73	HP PRODESK 600 G2 MT i9-6500+ MONITOR+OFFICE	25/11/16	20,855.28	PN16-30 02 04 MAGDAS ALINA	20,855.28	8h/zi
74	DIGESTOR CU MICROUNDRE MODEL SPEEDWAVE	20/09/16	54,338.40	PN16-30 02 05 PANA OVIDIU	54,338.40	4h/zi
75	ETUVA CU CONVENTIE NATURALA MODEL MEMMERT UNB 40	19/09/16	4,806.00	PN16-30 02 05 PANA OVIDIU	4,806.00	
76	BALANTA ANALITICA MODEL AS 220R2 CU KIT	21/10/16	4,860.00	PN16-30 02 05 PANA OVIDIU	4,860.00	2h / zi
77	SOFT WINDOWS PT SERVERE	28/04/16	17,929.44	PN16-30 02 05 PANA OVIDIU	17,929.44	functionare continua
78	AGITATOR ORBITAL KS 260 CU ACCESORII IKA	28/11/16	7,886.16	PN16-30 02 05 PANA OVIDIU	7,886.16	4h / zi
79	LAPTOP HP ZBOOK 17 G3 I7- 6820HQ	18/10/16	18,132.53	PN16-30 02 05 PANA OVIDIU	18,132.53	nu este cazul
80	DEBITMETRU	21/09/16	3,402.09	PN16-30 02 06 GLIGAN	3,402.09	functionare continua
81	DEBITMETRU ELECTRONIC MDF- 202EV-AAD SO2 7LS/MIN	3/8/2016	13,197.60	PN16-30 02 06 GLIGAN	13,197.60	functionare continua
82	DEBITMETRU ELECTRONIC MDF- 202EV-AAD SO2 12LS/MIN	3/8/2016	13,197.60	PN16-30 02 06 GLIGAN	13,197.60	functionare continua
83	CUPTOR TUBULAR RT 50-250/13	24/11/16	27,144.05	PN16-30 02 06 GLIGAN	27,144.05	4h / zi
84	COLOANA CROMATOGRAFICA FS CARBOXEN-1006 PLOT	17/11/16	4,047.60	PN16-30 02 06 GLIGAN	4,047.60	6h / zi

85	COLOANA GAZ CROMATOGRAF ZEBRON SEMIVOLATILES	14/11/16	2,213.27	PN16-30 02 06 GLIGAN	2,213.27	6h / zi
86	SOFT PCWHD	5/12/2016	2,543.58	PN16-30 02 06 GLIGAN	2,543.58	8h / zi
87	SOFT 250 PROTEUS PLATINUM EDITION	17/11/16	33,584.83	PN16-30 02 06 GLIGAN	33,584.83	8h / zi
88	SURSA PROGRAMABILA 1CH, 60V, 50A	15/11/16	7,264.25	PN16-30 02 06 GLIGAN	7,264.25	functionare continua
89	OSCILOSCOP DIGITAL 500MHZ	5/12/2016	58,674.00	PN16-30 02 06 GLIGAN	58,674.00	6h / zi
90	SISTEM ATEX INTEL COR I7-6700+ OFFICE 2016	14/11/16	6,594.01	PN16-30 02 06 GLIGAN	6,594.01	8h / zi
91	CUVA DE INCALZIRE/RACIRE 15L POLYSTAT ADVANCED	29/11/16	24,300.00	PN16-30 02 06 GLIGAN	24,300.00	4h / zi
92	HP PRODESK 600 G2 MT i9-6500+ MONITOR+OFFICE	25/11/16	15,641.46	PN16-30 02 06 GLIGAN	15,641.46	8h / zi
93	HP PRODESK 600 G2 MT i9-6500+ MONITOR+OFFICE	25/11/16	20,855.28	PN16-30 02 06 GLIGAN	20,855.28	8h / zi
94	WORKSTATION HP Z640 + MONITORE HP+OFFICE	28/11/16	22,570.08	PN16-30 02 06 GLIGAN	22,570.08	8h / zi
95	UNITATE CENTRALA WORKSTATION CORSAIRCC	28/11/16	5,886.00	PN16-30 02 06 GLIGAN	5,886.00	8h / zi
96	SOFT SOLIDWORKS PREMIUM	14/11/16	25,380.00	PN16-30 02 06 GLIGAN	25,380.00	8h / zi
97	POMPA CU DIAFRAGMA VACUUBRAND MD1 50/60	28/11/16	7,255.50	PN16-30 02 06 GLIGAN	7,255.50	functionare continua
98	Echipament de comunicatii / IP/TDM NEC SV 9100	08/12/2016	56,749.42	PN16-30 02 01 TURCU IOAN	56,749.42	functionare continua

* Am estimat gradul de utilizare prin nr. mediu de ore de utilizare / zi al echipamentului

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

	Nr.	Tip
Proiecte internaționale	4	<p>INFN Progetto Premiale:</p> <p>“ARIA” – propunere de proiect (octombrie 2016) in domeniul separarilor izotopice, intr-un consortiu format din urmasorii parteneri: INFN (Italia), Politecnico di Milano (Italia), Universita degli Studi Cagliari (Italia), Universita degli Studi Federico II Napoli (Italia), Princeton University (SUA), UCLA (SUA), INCDTIM (Romania) si Institutul Kurceatov (Rusia).</p> <p>M-ERANET 2016:</p> <p>“Functionalized magnetite for biomedical application (FUNBIOMAG)” – coordinator: Institute of Experimental Physics Slovak Academy of Sciences, Slovakia , parteneri: University of Szeged (USZ), Department of Physical Chemistry and Materials Science , Romanian Academy Timisoara Branch, Timisoara, Romania, INCDTIM, S.C. ROSEAL S.A., Odorheiu Secuiesc.</p> <p>“Magneto-active 3D fiber/hydrogel nanocomposite scaffolds for bone regeneration tissue engineering (FIBROGEL)” – coordinator: University of Cyprus, Nicosia, Cyprus, parteneri: University of Pavia, Italy, Romanian Academy Timisoara Branch, Timisoara, Romania, INCDTIM Cluj-Napoca, Romania, S.C. ROSEAL S.A., Odorheiu Secuiesc, Romania.</p> <p>ERA-NET COFUND WATERWORKS:</p> <p>“Identification of most important pollutants in different countries and decontamination of water for agriculture using combined methods dependent on climate”</p>
Proiecte naționale	32	<p>PN-III-P2-2.1-PED-2016 (Proiecte Experimental Demonstrative)</p> <p>INCDTIM coordonator:</p> <p>“ O noua abordare chemometrica pentru autentificarea vinurilor albe, utilizand markeri neconventionali”</p> <p>“Nanostructuri magnetice pentru tintire intracelulara in sistemele biologice”</p>

	<p><i>“Platforma electrochimica pentru detectia selectiva a ionilor de plumb”</i></p> <p><i>“Tehnologie de laborator pentru sinteza într-o singură etapă a grafenelor decorate cu nanoparticule metalice”</i></p> <p><i>“Tehnologie de laborator pentru detectia biomarkerilor de leucemie folosind noi materiale pe baza de grafene”</i></p> <p><i>“Suport de probă controlat termic cu introducere rapidă în vid”</i></p> <p><i>“Imbunătățirea procesării alimentelor în câmp de microunde”</i></p> <p><i>“Cuptor de microunde pentru uz casnic cu eficiența energetică sporită și controlul încălzirii alimentelor”</i></p> <p><i>“Obținerea de gaz de sinteză din biogaz prin reformare cu abur și CO₂ în prezența catalizatori bimodali”</i></p> <p><i>“Catalizatori pe bază de grafene cu conținut redus de platină eficienți pentru reacția de oxidare a metanolului în medii alcaline”</i></p> <p><i>“Sistem integrat autonom pentru purificarea avansată a apei utilizând nanocompozite magnetice și plasma rece”</i></p> <p><i>“Aparat de ablație laser combinat cu hipertermie magnetică pentru tratamentul cancerului de piele”</i></p> <p><i>“O nouă abordare pentru obținerea electrozilor de Plumb utilizați în acumulatorii auto”</i></p> <p>INCDTIM partener:</p> <p><i>“Impactul unor nanomateriale de tip grafena asupra unor specii de Hypericum cultivate in vitro”</i></p> <p><i>“Noi materiale de cimentare cu grafene utilizate în stomatologie”</i></p> <p><i>“Instrumente noi pentru analiza din fluide biologice a biomarkerilor responsabili pentru obezitatea infantilă”</i></p> <p><i>“Dezvoltări tehnologice inovative pentru Celule Solare Organice competitive”</i></p> <p><i>“Nanoimunisorbenti nonmagnetici și/sau superparamagnetici pe baza de nanoparticule de SiO₂ sau Fe₃O₄ utilizați în tehnica imunochimică de analiză pesticidelor MCPA din probe alimentare și de mediu”</i></p> <p><i>“Platforma senzorială microfluidică ultrasensibilă pentru detectarea moleculară selectivă în probe complexe”</i></p> <p><i>“Detectia Precisă Extralumenală a Tumorilor Colorectale folosind Tag-uri Acoperite cu Aur-Platină și Senzori de Proximitate Avansați”</i></p> <p><i>“Biocatalizator magnetic cu multistrat pentru sinteza în cicluri repetate a esterilor naturali”</i></p> <p><i>“Securizarea materialului lemnos prin marcarea cu compozit magnetic în scopul asigurării sustenabilității gestionării fondului forestier”</i></p> <p><i>“Miezuri magnetice sinterizate cu densitate mare de flux magnetic produse din pulberi pseudo core-shell/core-shell pentru aplicații la frecvențe medii și înalte”</i></p> <p><i>“Magneți permanenți performanți pe baza de nanoparticule magnetice cuplate prin schimb”</i></p> <p>PN-III-P4-ID-PCE-2016 (Proiecte de Cercetare Exploratorie)</p> <p><i>“Designul unor structuri supramoleculare de tip spin-crossover controlabile prin pulsuri laser ultrascurte”</i></p> <p><i>“Nanoparticule magnetice cu proprietăți de suprafață ajustate și cu rezistență la interacțiunea cu proteine: design rațional, sinteză, caracterizare și potențiale aplicații biomedicale”</i></p>
--	---

	<p>“Amprentarea izotopica si elementala a lemnului din Transilvania - mijloc de urmarire al materialului lemons”</p> <p>“Studii privind efectele de proximitate determinate de transferul de spini polarizati la interfata dintre semimetalul FePt si diferiti semiconductori dopati nanostructurati de banda interzisa larga”</p> <p>PN-III-P4-ID-PCCF-2016 (Proiecte Complexe de Cercetare de Frontiera)</p> <p>INCDTIM partener:</p> <p>“Senzori stocastici bazați pe grafene pentru diagnosticul molecular al cancerului tractului gastrointestinal superior”</p> <p>„Evaluarea riscului privind expunerea populatiei la metale grele prin consumul de legume si fructe cultivate in vecinatatea unor zone industriale dezafectate”</p> <p>“Controlul proprietatilor magnetice prin efecte de dimensionalitate si proximitate”</p> <p>PN-III-P5-ELI-RO-2016</p> <p>“Endoradioterapia tintita in cancer: proiectarea si demonstrarea conceptului de radiofarmaceutice nanostructurate, bazate pe radioizotopi produși prin reactii (y, n) ”</p>
--	---

Am luat in considerare aici doar propunerile de proiecte care au primit la evaluare punctaje peste pragul de finantare (> 80 puncte), sau aflate in curs de evaluare.

6. Rezultate transferate în vederea aplicării :

Tip rezultat	Instituția beneficiară (nume instituție)	Efecte socio-economice la utilizator
Tehnologie de laborator: obtinerea de derivati ai catecoloului, deuterati selectiv	INCDTIM: <i>Centrul de Cercetare pentru Izotopi Stabili Usori</i>	<p>Implementarea unei metode noi, mai ieftina si mai eficienta, pentru sinteza unuia dintre reactantii deuterati, DCI, utilizati in cadrul tehnologiei</p> <p>Trei produse noi in oferta de compusi deuterati ai centrului:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Catechol-D6 (99 %): $C_6D_4(OD)_2$ 2. Dopamine:HCl – ring D3, -ND2, -O₂D2 (98-99 %): $C_6D_3(OD)_2(CH_2)_2ND_2$ 3. L-Dopa – ring D3, -ND2, -O₂D2 (98-99 %): $C_6D_3(OD)_2(CH_2)ND_2COOD$ <p>Oferta completa se gaseste la adresa web http://centruizotopi.itim-cj.ro/servicii.html</p> <p>Acesti sunt oferiti la preturi competitive pentru clienti externi, dar vor fi utilizati si in cercetari proprii ale INCDTIM, in cadrul proiectului POC ID_37_672, pentru sinteza polidopaminei (si ai unor derivati ai acesteia) marcate izotopic</p>
Produs: Sistem de manipulare al modulelor Long Barrel ale Tile Calorimeter	CERN, Geneva : <i>Experimentul ATLAS</i>	Echipamentul este de tip unicat fiind realizat la cererea Colaborarii internationale ATLAS. Valorificarea acestuia se realizeaza prin contributia „in-kind” a clusterului ATLAS Romania la experimentul ATLAS conform angajamentelor cuprinse in MoU dintre Romania si CERN.
Produs : Stand de incercare al	CERN Geneva: <i>Experimentul ATLAS</i>	Standul de incercare va fi realizat in serie mica,

Mecanicii Mini-Drawer si al Sistemului de Manipulare Mini-Drawere	– Upgrade Phase II IFAE Barcelona: <i>Mechanical Department</i> INCDTIM: <i>Atelier Prototipuri</i>	fiind destinat viitorilor producatori ai componentelor necesare upgradarii electronicii Tile Calorimeter a experimentului ATLAS de la CERN. Valorificarea acestuia se realizeaza prin contributia „in-kind” a clusterului ATLAS Romania la experimentul ATLAS conform angajamentelor cuprinse in MoU dintre Romania si CERN.
---	---	--

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

Activitățile desfășurate în cadrul proiectului PN16-20 01 02 au avut și următoarele componente: (i) implicarea în pregătire profesională de doctorat ca urmare a colaborării cu USAMV Cluj Napoca, având ca subiect un referat de analiză asupra tezei de doctorat intitulată „METODĂ NECONVENȚIONALĂ DESTINATĂ PROTECȚIEI PLANTELOR DE PHASEOLUS VULGARIS L. VAR. NANUS ȘI DEZVOLTĂRII LOR ÎN CÂMP ELECTROMAGNETIC” în baza deciziei nr. 946/26.09.2016 a Rectorului Universității de Științe Agricole și Medicină Veterinară Cluj – Napoca; (ii) un parteneriat pentru colaborare economică cu SC BRINAL SA pentru propunerea unei teme de cercetare comune având ca subiect recuperarea electrosmogului (competiția PN-III-CERC-CO-PED-2016);

Activitățile desfășurate în cadrul proiectului PN16-20 01 03 au demonstrat capacitatea INCDTIM de a oferi soluții tehnologice complete (proiectare, execuție și montaj la beneficiarul final) legate de modernizarea detectorului ATLAS al LHC de la CERN, Geneva. Ele au o contribuție importantă la participarea noastră în cadrul inițiativei internaționale *ATLAS Collaboration* care, în afara de rezultatele concrete menționate anterior, s-a materializat și prin includerea unui cercetător din INCDTIM (Gabriel Popeneciu) în lista de autori pe un număr de 116 articole științifice publicate în 2016 în reviste de impact din domeniul *high-energy physics*: aceasta reprezintă o recunoaștere a importanței pe care activitatea de modernizare a echipamentelor experimentale de la LHC o are asupra rezultatelor științifice raportate.

8. Aprecieri asupra derulării programului și propuneri:

În concluzie la informațiile cuprinse în acest raport anual putem afirma că Programul Nucleu „IZOMOL” derulat de către INCDTIM Cluj și-a atins toate țintele majore planificate pentru anul 2016, și a avut o contribuție semnificativă la implementarea strategiei CDI a institutului, <http://www.itim-cj.ro/strategii>. Rezultatele obținute în acest an asigură premisele îndeplinirii cu succes a scopului propus pe întregul program, și anume „creșterea capacității de inovare a INCDTIM prin stimularea activităților CDI cu caracter aplicativ, și orientarea lor înspre rezolvarea de probleme societale și înspre satisfacerea cererii de transfer tehnologic și de cunoștințe”. Concret, se pot evidenția următoarele efecte directe ale implementării programului Nucleu „IZOMOL”:

- 1. Creșterea capacității de valorificare în economie a rezultatelor CDI din INCDTIM.** Patru dintre cele zece proiecte ale programului Nucleu, PN16 30 01 01 – PN16 30 01 04, contribuie la dezvoltarea accelerată a entităților din cadrul INCDTIM axate pe activități inovative și de dezvoltare tehnologică, respectiv: *Centrul de Cercetare și Tehnologii Avansate pentru Energii Alternative – CETATEA*, *Centrul de Cercetare pentru Izotopi Stabili Usori*, și *Atelierul de Prototipuri*. În această direcție, ar fi de remarcat următoarele:
 - ✓ Am demarat procesul de dezvoltare a metodelor de autentificare bazate pe rapoarte izotopice în abundența naturală prin extinderea lor la încă trei matrici de interes în economie: medicamente, fructe de pădure și ciuperci; s-au inițiat astfel primele baze de date necesare validării metodelor, și se va urmări în continuare promovarea și valorificarea lor în relația cu firme interesate, de exemplu în cadrul colaborărilor pe care INCDTIM le are cu mediul economic în cadrul proiectului POC „AGROTRANSILVANIA CLUSTER – CLUSTER INOVATIV SPECIALIZAT ÎN DOMENIUL BIOECONOMIEI”.
 - ✓ Am inițiat o abordare integrată a tehnologiilor bazate pe îmbogățire izotopică. În această etapă s-a reușit: (i) îmbunătățirea tehnologiei de marcarea izotopică cu ^2H a derivatilor de catechol; (ii) extinderea ofertei de compuși marcați cu deuteriu a *Centrul de Cercetare pentru Izotopi Stabili Usori* cu încă trei produse, obținute la prețuri mult mai avantajoase comparativ cu oferta pieței. Rezultatele reprezintă o premiză importantă pentru implementarea cu succes în etapa următoare a

unui lanț valoric complet al tehnologiilor izotopice la INCDTIM: separare izotopica, marcarea izotopica și utilizarea compusilor marcați.

- ✓ Am continuat colaborarea cu S.C. ROMBAT S.A. în vederea elaborării comune și transferul ulterior a informațiilor spre partenerul industrial, referitor la metode rapide de testare a grilelor-suport pentru electrozii bateriilor plumb-acid în vederea testării eficienței acestora. Colaborarea cu S.C. ROMBAT S.A. urmărește optimizarea tehnologiei de fabricare a electrozilor pozitivi destinați bateriilor “start-and-stop”.
- ✓ Am inițiat o colaborare cu S.C. BRINEL S.A. în domeniul de recuperare a electrosmogului din spațiul ambiental și conversia lui în energie electrică. Într-o primă fază de colaborare s-a elaborat în comun o cerere de finanțare pentru un proiect tip PN-III-CERC-CO-PED-2016.
- ✓ În ceea ce privește valorificarea energetică a hidrogenului în această etapă a proiectului am demarat cu succes cercetările legate de: (i) eficientizarea transformării hidrogenului în metan sintetic, (ii) dezvoltarea unor electrozi noi cu potențial de a fi utilizați ca anod în pilele de combustie cu metanol și (iii) prepararea pe scară largă cu eficiență crescută a materialelor poroase stocate de hidrogen de tip MOF. Prin aceste rezultate oferta de soluții inovative a INCDTIM legate de energia hidrogenului se îmbogățește și diversifică, adresându-se în special companiilor din domeniul energiilor alternative.
- ✓ Rezultatele obținute în cadrul proiectului privind participarea INCDTIM la experimentul ATLAS, constând în prototipuri și echipamente realizate în propriul *Atelier de Prototipuri*, duc la creșterea capacităților institutului în dezvoltarea unor proiecte de inginerie Hi-Tech de la etapa de cercetare până la realizare efectivă a produsului. Astfel, angajamentul INCDTIM în cadrul colaborării ATLAS de a produce mecanica mini-drawer și echipamentele de manipulare în timpul instalării acesteia, necesare upgradării detectorului Tile Calorimeter, primește o confirmare solidă din punct de vedere al soluțiilor tehnice propuse cât și în capacitatea de execuție, testare și certificare.

2. **Largirea bazei de cunoștințe noi, rezultate și expertiză pe domeniile CDI majore ale INCDTIM.** Prin intermediul celorlalte șase proiecte ale programului Nucleu, PN16 30 02 01 – PN16 30 02 06, s-au derulat în cadrul celor patru departamente ale INCDTIM cercetări cu caracter predominant aplicativ, dar și fundamental, cu scopul de a lărgi baza de cunoștințe noi, rezultate și expertiză care să susțină: (i) activități ulterioare de transfer tehnologic, fie în relație directă cu mediul economic, fie prin intermediul centrelor de cercetare ale INCDTIM menționate mai sus (de exemplu, acolo unde este necesară creșterea nivelului de maturitate tehnologică – TRL – al soluțiilor furnizate) și (ii), obținerea de rezultate preliminare necesare pentru elaborarea de noi propuneri de proiecte în competițiile naționale și internaționale desfășurate în 2016. În această direcție ar fi de remarcat următoarele:

- ✓ Au fost dezvoltate materiale nanostructurate noi cu proprietăți controlate adecvate aplicațiilor în nanomedicină și depoluarea apelor: nanoparticule magnetice, clusteri magnetici, nanocompozite. Creșterea nivelului de expertiză a cercetătorilor implicați în proiect în domeniul materialelor avansate nanostructurate a fost valorificată în 2016 prin: (i) utilizarea rezultatelor obținute pentru diversificarea ofertei de servicii inovative și transfer de cunoștințe către agenți economici interesați; (ii) noi propuneri de proiecte naționale PNIII și internaționale M-ERANET.
- ✓ A fost optimizat, dezvoltat și implementat un procedeu simplu, rapid și necostisitor de obținere a unui nou material nanocompozit pe baza de chitosan și grafene dopate cu atomi de azot, cu aplicabilitate în domeniul detecției de ioni metalici din soluții apoase.
- ✓ Diodă hibridă organic-anorganic pe bază de compusi moleculari cu centri metalici. Am optimizat și implementat o metodă modernizată de obținere a joncțiunii AlZnO/ZnO/FePc/Au și NdZnO/ZnO/FePc/Au pe substrat rigid și/sau flexibil prin tehnici de depunere epitaxială cu fascicul molecular.
- ✓ Au fost inițiate studii legate de distribuția așa-numitelor „elemente critice din punct de vedere tehnologic - Technology-Critical Elements - TCE”, cum ar fi: Nb, Ta, Ga, In, Ge, Tl, Te, grupa platinei (PGE: Pt, Os, Ru, Rh, Pd and Ir), și cea mai mare parte a pamanturilor rare (REE: Y, La, Ce, Pr, Nd, Sm,

Eu, Gd, Tb, Dy, Yb, Lu) in partile componente ale plantelor. Impactul acestor elemente, a caror utilizare este in continua crestere, asupra mediului inconjurator si asupra sanatatii nu este cunoscut, evaluarea acestui impact fiind o provocare la nivel international. Rezultatele obtinute reprezinta un punct de plecare important in dezvoltarea unor proiecte de cercetare viitoare ce vor avea ca tematica monitorizarea si distributia TCE-urilor in apa, sol, plante.

- ✓ In procesul de elaborare de noi materiale compozite utilizate ca electrozi in baterii de Li-ion s-au realizat noi sisteme nanocompozite (nanoparticule) pe baza de magnetita (semimetal) si oxid de staniu (semiconductor) in structura „core-shell”. In continuare se va urmări daca si cum procesele evidentiata in acest nou tip de compozite pot fi corelate cu cresterea performanțelor electrochimice ale anozilor in baterii.
- ✓ S-au preparat si caracterizat un nou tip nanostructură magnetica pe baza de magnetită (soft) si aliaj CoPt (hard), $\text{Fe}_3\text{O}_4@ \text{CoPt}$ (structură „core-shell”). Cuplajul celor doua faze magnetice la nanoscală poate fi ajustat prin compoziție, atmosfera si temperatura de tratament termic rezultând un nou sistem corelat proprietăți-preparare cu aplicații in stocarea de (1) energie magnetica (magneți permanenți cuplați prin schimb) si (2) de informație.
- ✓ S-au obținut nanoparticule pe bază de fier si/sau mangan (ex. Fe^0 , Fe_3O_4 , MnO_2 , Fe@MnO_2 etc) prin metode biosintetice. S-a implementat o nouă metodă de laborator pentru obținerea nanoparticulelor de MnO_2 cu proprietăți controlabile printr-un procedeu biosintetic. Materialul a fost testat privind activitatea catalitică pentru obținerea de biocombustibili.
- ✓ Rezultatele privind eficientizare a tehnologiilor de separare izotopica obținute pana in prezent (refluxoare și instalații de automatizare) permit perfecționarea instalațiilor existente de separare și producere a izotopului ^{15}N prin schimb chimic NO (NO_2) – HNO_3 la presiune, astfel încât cantitatea de izotop obținută în unitatea de timp sa se dubleze față de cea obținută prin operare la presiunea atmosferică.
- ✓ Dezvoltarea de tehnologii de remediere pentru decontaminarea zonelor afectate are o importanta majora pentru protejarea generatiilor prezente si viitoare printr-o reconstructie ecologica a zonelor deteriorate. In comparatie cu celelalte metode (fizice, chimice si biologice), fitoremedierea este o tehnica inovatoare, mai putin costisitoare, eficienta, care utilizeaza plante pentru a elimina poluantii din mediu sau pentru a reduce toxicitatea lor, reprezentand o strategie de remediere pentru decontaminarea solului si a resurselor de apa.

3. **Cresterea vizibilitatii internationale.** In afara de contributia pe care o aduce la participarea INCDTIM in cadrul *ATLAS Collaboration*, consorțiul care gestioneaza experimentele pe detectorul ATLAS al LHC (CERN, Geneva), programul Nucleu „IZOMOL” a furnizat, prin rezultatele obtinute pana in prezent, o baza solida pentru implicarea in noi colaborari internationale, si anume:

- ✓ *DarkSide Collaboration*, <http://darkside.lngs.infn.it/collaboration/>. Este o initiativa internationala a INFN (Istituto Nazionale di Fisica Nucleare, Italia), care reuneste cercetatori de la 40 de institute si universitati din toata lumea, printre care INFN, Princeton University, CERN, ETH, Fermi Lab, JINR Dubna etc. si are drept scop principal implementarea unui experiment pentru detectia directa a *Materiei Intunecate* cu ajutorul unui detector ultra-sensibil cu Ar lichid, instalat subteran la LNGS, Gran Sasso. INCDTIM a devenit membru al acestei actiuni colaborative prin implicarea sa directa in proiectul ARIA, a carui obiectiv major este dezvoltarea tehnologiei necesare saracirii in izotopul radioactiv ^{39}Ar a argonului extras din mina Cortes (SUA) – dupa saracire, argonul obtinut va fi utilizat ulterior pentru constructia detectorului care este prevazut sa contina in final 20 t de ^{40}Ar ultrapur.
- ✓ *COST Action TD1407 - Network on Technology-Critical Elements – from environmental processes to human health threats*. Cercetarile dezvoltate in cadrul tematicii *PN16-30 02 04: Dezvoltarea unor metode alternative pentru depoluarea apei si solului* sunt direct legate de tematica actiunii COST la care INCDTIM este partener alaturi de alte 23 de tari. Participarea INCDTIM la aceasta actiune este legata de grupul de lucru *Human exposure and toxicology*, cu un accent special pe acumularea elementelor din grupul pamanturilor rare si a platinei pe lantul trofic.

- ✓ TAIEX (Technical Assistance and Information Exchange instrument of the European Commission – Proiect *Determination of the Quality of Nectar and Fruit Juices - Contract no:62224*). In cadrul acestui proiect specialistii din INCDTIM au oferit un training de o saptamana unui grup format din trei cercetatori din Macedonia. In cadrul acestui stagiu de lucru, cercetatoarele din Macedonia au fost initiate in aplicarea metodelor izotopice de autentificare a sucurilor de fructe, in ceea ce priveste detectia apei si zaharurilor exogene, de catre specialistii INCDTIM.

DIRECTOR GENERAL,

Dr. Ing. BOT Adrian

DIRECTOR DE PROGRAM,

Dr. FILIP Claudiu

DIRECTOR ECONOMIC,

Dr. Ec. NICOARA Diana