



REZUMAT RAPORT ȘTIINȚIFIC FINAL

Durata proiectului: octombrie 2020-octombrie 2022

Titlul proiectului: Noi membrane compozite nanostructurate cu proprietăți fotocatalitice îmbunătățite pentru purificarea apei

Cod proiect: PN-III-P1-1.1-TE-2019-0594; Acronim: CleanH2O; Contract: TE164 din 22/10/2020

ECHIPA DE LUCRU:

Dr. Petronela Pascariu – **Director de proiect**
Dr. Corneliu Cojocaru, **Cercetator cu experiență**
Dr. Petrisor Samoila, **Tânăr cercetator**
Dr. Mihaela Homocianu, **Tânăr cercetator**
Drd. Ionela Grecu, **Doctorand**

Rezumat

Proiectul CleanH2O a avut ca obiectiv principal dezvoltarea de noi materiale compozite de tipul TiO₂/grafene/polimer cu proprietăți mecanice avansate în scopul fotodegradării coloranților organici persistenți în apele reziduale provenite din industria textilă. În plus, s-a apelat la modelarea și optimizarea procesului de fotodegradare, astfel încât acesta să prezinte eficiență maximă. Asigurarea celor mai bune rezultate s-a realizat ținându-se cont de următoarele obiective principalele: **O1**. Prepararea de noi materiale hibride nanostructurate bazate pe TiO₂ dopat/polimer prin metoda electrofilării; **O2**. Includerea grafenei în materialele compozite noi dezvoltate în scopul îmbunătățirii proprietăților mecanice și fotocatalitice; **O3**. Proiectarea, modelarea și optimizarea procesului de fotodegradare utilizând materialele noi dezvoltate; și **O4**. Managementul proiectului și diseminarea rezultatelor. Componenta anorganică bazată pe TiO₂ dopat cu Sm și membrana compozit TiO₂:Sm[15%]/PVDF/GO[2.5%] au fost selectate pentru programarea activă a experimentelor, modelarea și optimizarea procesului de fotodegradare. S-a demonstrat că sistemul membranar nou dezvoltat posedă performanțe fotocatalitice remarcabile cu o eficiență de îndepărtare a culorii de până la 100% (în 60 minute) și o mineralizare de aproximativ 65% (în 300 minute). Mai mult decât atât,

reutilizarea și stabilitatea membranei s-au dovedit a fi foarte bune după 5 cicluri de folosire ceea ce ne validează îndeplinirea cu succes a obiectivelor propuse în proiect. Toate activitățile au fost atent monitorizate și realizate în totalitate având ca scop final dezvoltarea domeniului științific propus în cererea de finanțare.

Pe lângă obiectivele științifice, proiectul CLEANH2O a construit și consolidat o echipă tânără de cercetare cu noi perspective în domeniul purificării apei și protecției mediului, precum și dezvoltarea pe viitor de noi tehnologii cu aplicabilitate industrială. Echipa de cercetare și-a adus contribuții originale în domeniu și a crescut vizibilitatea cercetării românești prin articole publicate în reviste internaționale (indexate ISI) cu factori de impact relevanți (o medie de peste 5).

Rezultatele științifice dezvoltate în cadrul acestui proiect au fost diseminate prin lucrări publicate (acceptate/trimise) în reviste internaționale, precum și prin prezentări la conferințe naționale/internaționale. Toți indicatorii propuși în cererea de finanțare (4 lucrări publicate în reviste cotate ISI și 4 prezentări la conferințe naționale/internaționale) au fost îndepliniți cu succes, fiind, de fapt, raportate 10 lucrări publicate în reviste cotate ISI cu factori de impact ridicați (**media de 5.87**), 2 lucrări ISI trimise spre publicare și 10 participări la conferințe naționale/internaționale, dintre care o participare a fost conferință invitată. O privire de ansamblu asupra diseminării rezultatelor este rezumată în cele ce urmează.

Articole publicate (acceptate sau trimise) în jurnale internaționale cotate ISI

[1]. *C. Cojocaru, A.C. Humelnicu, P. Pascariu, P. Samoila*, Artificial neural network and molecular modeling for assessing the adsorption performance of a hybrid alginate-based adsorbent, *Journal of Molecular Liquids* 337 (2021) 116406, **IF: 6.633 (Q1)**.

Link: <https://doi.org/10.1016/j.molliq.2021.116406>

[2]. *P. Pascariu**, *C. Cojocaru, P. Samoila*, N. Olaru, A. Bele, A. Airinei, Novel electrospun membranes based on PVDF fibers embedding lanthanide doped ZnO for adsorption and photocatalytic degradation of dye organic pollutants, *Materials Research Bulletin* 141 (2021) 111376, **IF: 5.600 (Q2)**.

Link: <https://doi.org/10.1016/j.materresbull.2021.111376>

[3]. M. Sucheș, E.G. Petromichelaki, C. Romanitan, M. Androulidaki, A. Manousaki, Z. Viskadourakis, R. Ikram, *P. Pascariu**, G. Kenanakis, Obtaining nanostructured ZnO onto Si coatings for optoelectronic applications via eco-friendly chemical preparation routes, *Nanomaterials* 11,2490 (2021), 1–30, **IF: 5.719 (Q1)**.

Link: <https://www.mdpi.com/2079-4991/11/10/2490>

[4]. *P. Pascariu**, *C. Cojocaru*, A. Airinei, N. Olaru, I. Rosca, E. Koudoumas, M.P. Sucheș, Innovative Ag-TiO₂ nanofibers offering excellent photocatalytic and antibacterial action, *Catalysts* 11, 1234 (2021) 1–20, **IF: 4.501 (Q2)**.

Link: <https://www.mdpi.com/2073-4344/11/10/1234>

[5]. *P. Pascariu**, *C. Cojocaru*, *M. Homocianu*, *P. Samoila*, A. Dascalu, M. Sucheș, New La³⁺ doped TiO₂ nanofibers for photocatalytic degradation of organic pollutants: Effects of thermal treatment and doping loadings, *Ceramics International* 48 (2022) 4953–4964, **IF: 5.532 (Q1)**.

Link: <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2021.11.033>

[6]. *P. Pascariu**, *C. Cojocaru*, *P. Samoila*, A. Airinei, N. Olaru, A. Rotaru, C. Romanitan, L.B. Tudoran, M. Sucheș, Cu/TiO₂ composite nanofibers with improved photocatalytic performance under UV and UV-visible light irradiation, *Surfaces and Interfaces* 28, 101644 (2022) 1–15, **IF: 6.137 (Q1)**.

Link: <https://doi.org/10.1016/j.surfin.2021.101644>

[7]. *M. Homocianu*, *P. Pascariu**, High-performance photocatalytic membranes for water purification in relation to environmental and operational parameters, *Journal of Environmental Management* 311, 114817 (2022) 1–20, **IF: 8.910 (Q1)**.

Link: <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2022.114817>

[8]. B.C. Condurache, *P. Samoila*, *C. Cojocaru*, *P. Pascariu*, V. Harabagiu, Innovative nanostructured magnetite/wool/polysiloxane composite as magnetic adsorbent for oil spill removal, *Comptes Rendus Chimie* 25 (no. S3) (2022) 1–16, **IF: 2.55 (Q3)**.

Link: <https://comptes-rendus.academie-sciences.fr/chimie/item/10.5802/crchim.168.pdf>

[9]. *P. Pascariu**, *C. Cojocaru*, *M. Homocianu*, *P. Samoila*, Tuning of Sm³⁺ and Er³⁺-doped TiO₂ nanofibers for enhancement of the photocatalytic performance: Optimization of the photodegradation conditions, *Journal of Environmental Management* 316 (2022) 115317, **IF: 8.910 (Q1)**.

Link: <https://doi.org/10.1016/j.jenvman.2022.115317>

[10] *M. Homocianu*, A. Airinei, A.M. Ipate, C. Hamciuc, Spectroscopic recognition of metal ions and non-linear optical (NLO) properties of some fluorinated poly(1,3,4-Oxadiazole-Ether)s, *Chemosensors* 10(183) (2022) 1–18, **IF: 4.229 (Q1)**.

Link: <https://doi.org/10.3390/chemosensors10050183>

[11] *P. Pascariu**, *C. Cojocar*, *M. Homocianu*, *P. Samoila*, *I. Grecu*, A. Bele, New composite membranes based on PVDF fibers loaded with TiO₂:Sm nanostructures and reinforced with graphene/graphene oxide for photocatalytic applications, *Surfaces and Interfaces* 34 (2022) 102382, **IF: 6.137 (Q1)**.

Link: <https://doi.org/10.1016/j.surfin.2022.102382>

[12] *P. Pascariu**, *C. Cojocar*, *M. Homocianu*, *P. Samoila*, C. Romanitan, Electrospun Sn²⁺ doped TiO₂: Synthesis, structural, optical and catalytic performance as a function of Sn²⁺ loading and calcination temperatures, *Ceramics International* (under review), **IF: 5.532 (Q1)**.

Prezentari la conferinte Internationale si Nationale

- **Conferințe invitate**

[1]. *P. Pascariu*, *C. Cojocar*, A. Airinei, M. Sucheș, PVDF fibers embedding lanthanide doped ZnO membranes for adsorption and photocatalytic degradation of dye organic pollutants (invited presentation), The 3rd International Workshop Advances on Photocatalysis (AdvPhotoCat-EE2021), 2021, June 28 –29, Online event, Bucharest, România.

Links: <https://photocatalysis-workshop.eu/invited-speakers/>

<https://photocatalysis-workshop.eu/wp-content/uploads/2021/06/Program-Draft-Final-with-chairs.pdf>

https://photocatalysis-workshop.eu/wp-content/uploads/2021/07/book_of_abstract_FINAL_m.pdf

- **Comunicări orale**

[1]. *P. Pascariu*, *C. Cojocar*, *M. Homocianu*, *P. Samoila*, M. Sucheș, New La doped TiO₂ nanofibers for photocatalytic degradation of dye and drug: the effect of thermal treatment and La doping amount, (oral presentation), The 3rd International Workshop Advances on Photocatalysis (AdvPhotoCat-EE2021), 2021, June 28 –29, Online event, Bucharest, România.

Links:

<https://photocatalysis-workshop.eu/wp-content/uploads/2021/06/Program-Draft-Final-with-chairs.pdf>

https://photocatalysis-workshop.eu/wp-content/uploads/2021/07/book_of_abstract_FINAL_m.pdf

[2]. *P. Pascariu*, *C. Cojocar*, M. Sucheș, 1D-lanthanides (La, Sm, Er) doped TiO₂ photocatalysts for degradation of organic pollutants, 13th International Conference on Physics of Advanced Materials (ICPAM-13), September 24-30, 2021, hybrid event, Sant Feliu de Guixols, Costa Brava, Spain.

Links:

https://icpam.ro/main/wp-content/uploads/short-program-icpam_v9.pdf

<https://icpam.ro/main/wp-content/uploads/BoA-ICPAM-13-v3.pdf>

[3] L. B Tudoran, C. Romanitan, *P. Pascariu*, M. P. Suchea, Structural characterization of rare-earths doped TiO₂ nanofibers, 13th International Conference on Physics of Advanced Materials (ICPAM-13), September 24-30, 2021, hybrid event, Sant Feliu de Guixols, Costa Brava, Spain.

Links:

https://icpam.ro/main/wp-content/uploads/short-program-icpam_v9.pdf

<https://icpam.ro/main/wp-content/uploads/BoA-ICPAM-13-v3.pdf>

[3]. *P. Pascariu*, *M. Homocianu*, Electrospun Cu doped TiO₂ nanofiber composites with high photocatalytic activity, New Trends and Strategies in the Chemistry of Advanced Materials with Relevance in Biological Systems, Technique and Environmental Protection, October 7-8, 2021, online event, Timișoara, România.

Links:

<https://www.ntcr-2021.ro/docs/ntcr2021-program.pdf>

<https://www.ntcr-2021.ro/docs/ntcr2021-book-of-abstracts.pdf>

[5]. *I. Grecu*, *P. Samoila*, *C. Cojocar*, *P. Pascariu*, V. Harabagiu, Enhanced photodegradation of Evans Blue by novel samarium doped zinc aluminium spinel ferrites, ICMPP – Open Door to the Future Scientific Communications of Young Researchers, MacroYouth'2021, 2nd Edition, November 19, 2021, online event, Iasi.

Links:

<https://icmpp.ro/macroyouth2021/program.php>

https://icmpp.ro/macroyouth2021/files/MacroYouth2021_Program+Abstracts.pdf

[6]. *P. Pascariu*, Preparation and characterization of new membrane-based on PVDF fibers loaded with TiO₂:Sm reinforced with graphene/graphene oxide for wastewater cleaning, 14th International Conference on Physics of Advanced Materials (ICPAM-14), September 8-15, 2022, hybrid event, Dubrovnik, Croatia.

Links:

[7]. *P. Pascariu*, L. Georgescu, E. Koudoumas, M.P. Suchea, Electrospinning of TiO₂ based semiconductor nanofibers with enhanced photocatalytic properties, 36th Panhellenic Conference on Solid State Physics and Materials Science, September 26-28, 2022, Heraklion, Crete, Greece.

Links:

<https://fsk36.materials.uoc.gr/fsk36program.pdf>

<https://fsk36.materials.uoc.gr/fsk36abstracts.pdf>

- **Prezentări de tip poster**

[1]. *I. Grecu, P. Samoila, C. Corneliu, P. Petronela*, V. Harabagiu, Evans blue photodegradation by novel samarium doped zinc aluminium spinel ferrites, (poster presentation), The 3rd International Workshop Advances on Photocatalysis (AdvPhotoCat-EE2021), June 28 –29, 2021, Online event, Bucharest, România.

Links:

<https://photocatalysis-workshop.eu/wp-content/uploads/2021/06/Program-Draft-Final-with-chairs.pdf>

https://photocatalysis-workshop.eu/wp-content/uploads/2021/07/book_of_abstract_FINAL_m.pdf

[2]. *M. Homocianu, P. Pascariu*, Photocatalytic composite membranes for water treatment: results, limitations, and new insights, New Trends and Strategies in the Chemistry of Advanced Materials with Relevance in Biological Systems, Technique and Environmental Protection, October 7-8, 2021, online event, Timișoara, România.

Links:

<https://www.ntcr-2021.ro/docs/ntcr2021-program.pdf>

<https://www.ntcr-2021.ro/docs/ntcr2021-book-of-abstracts.pdf>

[3]. *C. Cojocaru, P. Pascariu*, A.C. Humelnicu, *P. Samoila*, Adsorption of a cationic dye onto alginate-based magsorbent: Machine learning and molecular modeling approaches, The 7th International Conference: "Ecological and Environmental Chemistry-2022", March 3-4, 2022, Chisinau, Republic of Moldova.

Links:

<http://eec-2022.mrda.md/wp-content/uploads/2016/02/EEC-2022-FINAL-Program.pdf>

<http://eec-2022.mrda.md/wp-content/uploads/2016/02/EEC-2022-Abstract-Book-Vol-1-Final.pdf>