

REZUMAT EXECUTIV AL ACTIVITĂȚILOR REALIZATE ÎN PERIOADA DE IMPLEMENTARE

În prima etapă a proiectului **PhotoActComp** (anul 2025) au fost îndeplinite integral activitățile prevăzute, vizând fundamentarea științifică și tehnologică necesară dezvoltării unor materiale fotocatalitice hibride pe bază de nanoparticule de ZnO fotosensibilizate și matrici de tip hidrogel.

- Etapa 1/2025 a inclus trei direcții principale: sinteza și caracterizarea fotocatalizatorilor ZnO-xantenă (O1), elaborarea și investigarea compozitelor fotocatalitice în hidrogeluri Xn-PVA (O2) și activități de instruire, diseminare și publicare (O4). Toate obiectivele au fost realizate integral (100%).
- Pentru atingerea obiectivului **O1**, s-a realizat sinteza extinsă și optimizarea nanoparticulelor de ZnO prin variația precursorilor ($\text{Zn}(\text{Ac})_2$, ZnSO_4 , $\text{Zn}(\text{NO}_3)_2$), a agenților de precipitare (NaOH , NH_4OH , PEI), a raportului $\text{OH}^-/\text{Zn}^{2+}$, a modului de introducere a reactivilor, a vitezei de agitare și a tratamentului termic. Cele 13 probe obținute au permis identificarea condițiilor optime pentru particule cu dimensiuni reduse, dispersie bună și cristalinitate ridicată. Caracterizările FTIR, SEM, STEM, TEM, XRD, DLS și potențial Zeta au confirmat influența determinantă a precursorului și a proceselor de nucleere asupra morfologiei, stabilității coloidale și purității cristaline.
- În continuare, nanoparticulele au fost fotosensibilizate cu roz bengal (RB) prin două strategii – adsorbție fizică și modificare chimică. Au fost obținute patru serii de materiale hibride (Z2-RB, Z3-RB, Z3-RB/2, Z4-NH₂-RB), care au facilitat evaluarea efectului metodei de imobilizare asupra stabilității și eficienței fotocatalitice. Studiile de cinetică și doză au arătat o adsorbție rapidă a RB, cu atingerea echilibrului în 30–60 min, iar nanoparticulele derivate din precursor sulfat au prezentat capacitatea cea mai ridicată. Funcționalizarea chimică a condus la o legare bună a colorantului, confirmată prin FTIR și prin diminuarea intensităților difracțiilor XRD, fără modificarea structurii cristaline a ZnO.
- Caracterizarea UV-Vis și de fluorescență a evidențiat proprietăți optice specifice ZnO nanometric, cu valori E_g între 3,29–3,52 eV și emisii caracteristice defectelor de rețea, relevante pentru aplicațiile fotocatalitice. Calcinarea a redus banda interzisă și a intensificat emisia în vizibil, îmbunătățind transferul de electroni în procesele fotoinduse.
- În cadrul obiectivului **O2**, au fost preparate hidrogeluri pe bază de xantan și PVA prin reticulare chimică și criogelare, urmată de încorporarea materialelor ZnO nemodificate sau ZnO modificate cu RB. Analiza SEM a confirmat integrarea omogenă a nanoparticulelor în rețelele de tip hidrogel, iar studiile de umflare au evidențiat stabilitatea structurală a compozitelor.
- Activitățile aferente **O4** au inclus elaborarea unui studiu bibliografic, dezvoltarea paginii web a proiectului, pregătirea și transmiterea unui articol către reviste Q1/Q2 și participarea la conferințe științifice. Membrii echipei au participat, de asemenea, la activități de instruire specifice domeniului.
- Etapa 1/2025 s-a încheiat cu succes, asigurând baza științifică și experimentală necesară etapelor următoare, dedicate optimizării compozitelor fotocatalitice și validării performanțelor acestora în procese de depoluare.
- ✓ Diseminare rezultate: **2 lucrări publicate, 3 participări la conferințe internaționale (1 comunicare orală și 2 postere).**
- ✓ S-a realizat și actualizat pagina web a proiectului:
<https://icmpp.ro/projects/l4/about.php?id=176>

Având în vedere îndeplinirea cu succes a tuturor activităților prevăzute în această etapă a proiectului **PhotoActComp**, se poate concluziona faptul că **gradul de realizare a obiectivelor Etapei I este 100%.**

Director Proiect, Dr. Nicușor FIFERE

