



ACADEMIA ROMÂNĂ
SCOSAAR

Anexa nr.6

REZUMATUL TEZEI DE ABILITARE

TITLUL: Structuri semiconductoare oxidice cu proprietăți ajustabile pentru aplicații în protecția mediului și energie

Domeniul de abilitare: CHIMIE

Autor: Dr. Petronela PASCARIU

Teza de abilitare intitulată „*Structuri semiconductoare oxidice cu proprietăți ajustabile pentru aplicații în protecția mediului și energie*” evidențiază contribuțiile științifice importante realizate după susținerea tezei de doctorat (2012) și, cu precădere, progresele realizate în ultimii 12 ani. Lucrarea este structurată în trei secțiuni principale, fiecare reflectând direcțiile de cercetare consolidate, rezultatele originale generate și impactul lor în domeniul chimiei și al științei materialelor cu aplicații în diferite domenii de interes actual. Astfel, teza oferă o imagine coerentă și integrată asupra evoluției carierei de cercetător, a maturității științifice dobândite și a capacității de a conduce proiecte de cercetare și de a dezvolta direcții noi în aceste domenii.

Capitolul I (Realizări profesionale și academice) sintetizează cele mai relevante contribuții din perioada analizată, punând accent pe articolele științifice publicate și pe rolul avut în proiectele de cercetare, cu evidențierea rezultatelor cu impact. Sunt prezentate, de asemenea, premiile obținute, numărul de citări, activitatea editorială, precum și implicarea în formarea și coordonarea studenților doctoranzi și postdoctoranzi. În cei 12 ani de activitate științifică desfășurată după susținerea tezei de doctorat am publicat un număr de **74 lucrări științifice** (dintre care **52 ca autor principal și/sau de corespondență**), **6 articole publicate în volume de manifestări științifice**, **70 prezentări** la manifestări științifice naționale și internaționale (**7 conferințe invitate, peste 30 comunicări orale, și peste 30 prezentări tip poster**), coordonarea a **3 proiecte** de cercetare, precum și participarea în calitate de



membru în alte **7 proiecte naționale și internaționale**. Lucrările publicate se încadrează în reviste cu factor de impact mare conform clasificării din Web of Science.

În prezent, am un indice **Hirsh $h = 25$** (cumulat Pascariu P. sau Dorneanu P.), iar lucrările proprii au fost citate în **1948** articole de prestigiu cotate ISI (**1767** fără auto-citari) (Web of Science). Conform Scopus, indicele **Hirsch este 27** și un total de **2258 de citări**.

În 2023 am fost inclusă în clasamentul mondial **Top 2% Scientists Worldwide 2023 Stanford University** ("Updated science-wide author databases of standardized citation indicators" <https://doi.org/10.17632/btchxktzyw.6>).

Capitolul II (Contribuții științifice realizate în ultimii 12 ani) constituie secțiunea centrală a tezei, evidențiind direcțiile principale de cercetare în domeniul materialelor semiconductoare oxidice și al compozitelor polimer/nanostructuri anorganice. Acest capitol este structurat în trei subcapitole, corespunzătoare unor aplicații de interes, precum: fotocataliză, stocare de energie și senzori de umiditate.

În subcapitolul **II.1. Materiale anorganice pe bază de semiconductori oxidici utilizate în procese fotocatalitice** sunt prezentate rezultatele obținute privind dezvoltarea și optimizarea semiconductoarelor oxidice pe bază de ZnO și TiO₂, atât în formă pură, cât și dopată cu ioni de lantanide, metale nobile și tranziționale, sintetizați prin metoda electrofilării urmată de calcinare. Activitatea fotocatalitică a materialelor a fost evaluată pentru degradarea unor poluanți organici relevanți (coloranți și antibiotice), iar influența naturii dopantului și a parametrilor de reacție a fost analizată sistematic. Un rezultat reprezentativ îl constituie materialul ZnO dopat cu 0,1 % Pr, care a indus o degradare completă a oxitetraciclinei, parametri cinetici superiori și stabilitate bună în urma mai multor cicluri de utilizare. În paralel, au fost dezvoltate membrane hibride nanostructurate pe bază de ZnO sau TiO₂ integrate în matrice polimerică (PVDF, PVDF/GO), concepute pentru a facilita recuperarea catalizatorului. Aceste membrane au evidențiat eficiențe fotocatalitice remarcabile, cuprinse între 93–100 %, și stabilitate bună chiar și după zece cicluri de reutilizare. O parte din aceste rezultate au fost validate în cadrul proiectului TE (PN-III-P1-1.1-TE-2019-0594), demonstrând contribuții semnificative în proiectarea de materiale fotocatalitice avansate, cu potențial ridicat pentru aplicații durabile în tratarea apelor contaminate.

Subcapitolul **II.2. Nanostructuri anorganice și compozite polimer/nanostructuri anorganice utilizate în aplicații de stocare a energiei** sistematizează contribuțiile aduse la dezvoltarea unor



materiale nanostructurate destinate stocării de energie, cu accent pe semiconductori oxidici și compozite hibride polimer/nanoparticule anorganice. Utilizarea celor două metode de obținere electrofilarea și electropolimerizarea a permis obținerea unor structuri unidimensionale, poroase și cu suprafață activă mare, favorabile proceselor de încărcare–descărcare din supercapacitori.

Au fost investigate trei sisteme: TiO_2 pur și dopat cu Cu, heterojoncțiuni p–n NiO-SnO_2 , și nanocompozite PTh/Ni. Doparea TiO_2 cu ioni de Cu a îmbunătățit semnificativ răspunsul pseudocapacitiv, compozitul cu 0,5 % Cu demonstrând cele mai bune performanțe electrochimice. Pentru NiO-SnO_2 , raportul optim de 75:25 a generat cea mai eficientă sinergie între structură și caracteristici electrochimice, cu capacitanță specifică importantă și stabilitate superioară. Nanocompozitele PTh/Ni au evidențiat o creștere importantă a numărului de centri activi și a capacității, datorită integrării nanoparticulelor metalice.

Ultimul subcapitol, II.3. Fibre ceramice pe bază de materiale semiconductoare oxidice cu aplicații în domeniul senzorilor de umiditate, sistematizează contribuțiile aduse în obținerea de nanostructuri semiconductoare oxidice pentru detecția umidității, vizând două sisteme reprezentative: nanofibre compozite NiO-SnO_2 și nanostructurile de ZnO dopate cu 1 % lantanide. Ambele tipuri de materiale au fost obținute prin metoda electrofilării urmată de calcinare, metodă care duce la obținerea de arhitecturi unidimensionale poroase, cu suprafață specifică mare, favorabile proceselor de adsorbție–desorbție a vaporilor de apă.

Nanofibrele pe bază de NiO-SnO_2 au evidențiat o structură granulară bine definită și o sensibilitate ridicată la umiditate, manifestată prin scăderea rapidă a rezistenței și timpi de răspuns și recuperare foarte buni, în special pentru compozitul cu conținut ridicat de NiO. Acest comportament este atribuit sinergiei dintre semiconductorul de tip p (NiO) și cel de tip n (SnO_2), precum și porozității ridicate a fibrelor.

În cazul ZnO dopat cu lantanide, analizele XRD și XPS au confirmat formarea materialelor dopate și intensificarea hidroxilării suprafeței, dopanții influențând microstructura, defectele și morfologia. Din punct de vedere electric, doparea cu lantanide conduce la creșterea permitivității electrice relative, la reducerea rezistivității cu un ordin de mărime și la scurtarea timpilor de răspuns de la 98 s (ZnO pur) la 62–89 s pentru materialele dopate. Probele cu Ce prezintă cele mai mari valori ale coeficienților de sensibilitate (≈ 83 % la 33 % RH), ceea ce confirmă rolul ionilor multivalenți $\text{Ce}^{3+}/\text{Ce}^{4+}$ în generarea centrelor active.



ACADEMIA ROMÂNĂ
SCOSAAR

Anexa nr.6

Capitolul III, intitulat Direcții viitoare de cercetare, sistematizează un plan pentru dezvoltarea de materiale avansate pe bază de semiconductori oxidici, membrane hibride polimer–materiale anorganice și nanostructuri unidimensionale, cu aplicabilitate în domenii precum purificarea apei, stocarea de energie, senzori și aplicațiile biomedicale. O prioritate importantă o constituie proiectarea de fotocatalizatori capabili de un răspuns eficient în prezența luminii vizibile prin strategii precum doparea cu metale sau nemetale, realizarea de heterojoncțiuni p–n și integrarea de componente pe bază de carbon. În paralel, se urmărește dezvoltarea de membrane compozite recuperabile, cu stabilitate sporită, pentru tratarea apelor uzate, precum și proiectarea unor prototipuri de reactoare fotocatalitice la scară de laborator.

O altă direcție majoră care va fi abordată este cea de obținere a materialelor hibride polimeri/semiconductori oxidici pentru aplicații în domeniul energiei, în special supercapacitori de ultimă generație, folosind electrofilarea și electropolimerizarea ca metode principale de sinteză. În același timp, nanofibrele ceramice unidimensionale rămân o direcție strategică de cercetare, fiind vizate aplicații pentru detecția gazelor și umidității, consolidate de rezultatele anterioare și colaborările susținute cu institute naționale și internaționale.

Complementar acestor direcții, se pune accent pe promovarea excelenței științifice, atragerea de fonduri, consolidarea colaborărilor internaționale și formarea unei noi generații de cercetători, capabili să contribuie la avansul domeniilor emergente din chimie și știința materialelor.

Teza de abilitare se încheie cu referințele bibliografice care listează principalele date de literatură consultate pe parcursul elaborării acestei teze.