

Contractor: INCDFM
Cod fiscal : RO9068280

anexa la procesul verbal de avizare interna nr.

De acord,
DIRECTOR GENERAL
Dr. Ionut Enculescu

Avizat,
DIRECTOR DE PROGRAM
Dr. Lucian Pintilie

RAPORT DE ACTIVITATE AL FAZEI

Contractul nr.: 10N/10.03.2016; Act ad.2/2016

Proiectul PN16480101: Fenomene si procese fizico-chimice in sisteme nanometrice complexe, suprafete si interfete

Faza nr. 6 : Modificarea proprietatilor fotocatalitice in functie de parametri de sinteza a filmelor /straturilor subtiri de semiconductori oxidici.

Termen: 20.07.2016

1. Obiectivul proiectului:

Prezentul proiect isi propune sa desfasoare studii aprofundate privind fenomenele fizico-chimice care au loc in sisteme nanometrice complexe, pe suprafete sau la interfete, cu focalizare pe materiale functionale care au potential aplicativ in domenii industriale de inalta tehnologie, energetica, spatiu si securitate, protectia mediului si prevenirea poluarii, precum si in stiintele vietii.

2. Rezultate preconizate pentru atingerea obiectivului:

Principale tinte pe care ne propunem sa le atingem prin implementarea proiectului :

- intelegerea proceselor fizice in materiale si structurile lor, prin modelare si prin studiul proprietatilor feroelectrice, magnetice, optice si fotoelectrice ale acestora; in acelasi scop ne propunem sa studiem rolul structurii cristaline, efectele de dimensiune, rolul suprafetelor/interfetelor;
- modelarea dinamicii purtatorilor de sarcina in sisteme mezoscopice, in scopul modelarii tranzitiei de la fotoluminescenta la fotocurent si in scopul controlului optic si electric al starilor excitonice si biexcitonice si relevarea unui proces optic neliniar ca rezultat al interactiei exciton-foton;
- investigarea proprietatilor materialelor cuantice cu proprietati topologice particulare;
- studiul proceselor catalitice si fotocatalitice, al transferului de sarcina si al reactiilor chimice, cu aplicatii in materiale pentru energie, biomedicina si protectia mediului.

3. Obiectivul fazei:

Obținerea de sisteme de oxizi ai metalelor de tranziție cu “decoratii” (=dopati pe suprafața exterioară), cu proprietăți fotocatalitice îmbunătățite.

4. Rezultate preconizate pentru atingerea obiectivului fazei:

Sisteme de oxizi ai metalelor de tranziție cu “decoratii” (=dopati pe suprafața exterioară), curbe cinetice de descompuneri fotocatalitice, seturi de parametri de fit, date de caracterizare a sistemelor după caz (spectroscopie de absorbție, UV-VIS, spectroscopie de infraroșu, difracție de raze X, microscopie electronică, termogravimetrie, masuratori de unghi de contact, etc).

5. Rezumatul fazei: (maxim 5 pagini)

Introducere

În ultimii ani, materialele compozite având drept constituenți nanoparticulele semiconductoare (ZnO, CdS, TiO₂) au devenit atractive datorită aplicațiilor în fotocataliză [1, 2]. Pentru aceleași aplicații și alți semiconductori organici precum PbS, CdSe, Bi₂S₃, InP, CdS, [3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10] sunt interesați având o serie de avantaje față de coloranți și anume: au o mai bună stabilitate; domeniul spectral poate fi controlat prin dimensiunea particulelor astfel încât să fie cât mai apropiat de cel al luminii provenite de la soare; randamentul de generare al perechilor electron-gol al fotonilor este mai mare [6, 11]. Dintre semiconductorii anorganici, CdS s-a dovedit a fi atractiv și datorită potențialelor sale aplicațiilor în dispozitive optoelectronice, cum ar fi diode emițătoare de lumină, lasere, tranzistori, etc. [12, 13] sau în dispozitive fotovoltaice și fotosensibile [14, 15]. Printre semiconductori, ZnO este un semiconductor obișnuit de tip n, fiind utilizat pe scară largă, deoarece nu este toxic, are energia benzii interzise ~3,3eV, are stabilitate pe termen lung, costuri reduse de obținere și biocompatibilitate. Prin modificarea suprafeței micro/nanostructurilor de ZnO cu CdS, se obține o amplificare a fotoconducției în domeniul ultraviolet [16]. De asemenea, astfel de nanostructuri decorate cu CdS prezintă o activitate fotocatalitică este mai bună la descompunerea apei în hidrogen [17].

Studiul de față este axat pe sinteza chimică a compozitelor de ZnO-CdS și caracterizarea complexă a acestora. Sinteza compozitelor constă în două etape: i) prepararea nanoparticulelor de CdS prin reacția chimică dintre Cd(NO₃)₂ și Na₂S și ii) generarea microparticulelor de ZnO prin reacția dintre Zn(NO₃)₂ și NaOH, în prezența nanoparticulelor de CdS.

Experimental

Prepararea compozitelor de ZnO-CdS

Reactanții chimici Cd(NO₃)₂·4H₂O, Na₂S, Zn(NO₃)₂·6H₂O și NaOH sunt de proveniență Merck și au fost utilizați fără nici o purificare suplimentară.

i) prepararea nanoparticulelor de CdS prin reacția chimică dintre Cd(NO₃)₂ și Na₂S

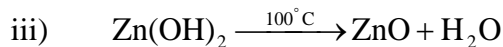
Precursorii: Cd(NO₃)₂·4H₂O și Na₂S au fost dizolvați în apă distilată (agitare continuă timp de 20 minute la temperatura camerei). Ulterior soluția de Na₂S a fost adăugată prin picurare în soluția Cd(NO₃)₂ (cu agitare continuă). Precipitatul a fost centrifugat și spălat de câteva ori până când s-a obținut un pH neutru și în final a fost uscat vid la temperatura de 100°C timp de 2 ore.

ii) generarea microparticulelor de ZnO prin reacția chimică dintre Zn(NO₃)₂ și NaOH, în prezența unor cantități diferite de nanoparticule de CdS

Diferite cantități de CdS (2%, 5%) au fost dispersate în apă distilată cu agitare continuă. Această soluție a fost notată cu A. Precursorii: Zn(NO₃)₂·6H₂O și NaOH au fost dizolvați în apă distilată (agitare continuă), obținându-se soluțiile B și respectiv C. Ulterior soluțiile B și C au fost adăugate prin picurare în soluția A (agitare continuă timp de 30 minute). Precipitatul a fost centrifugat și spălat de câteva ori până când s-a obținut un pH neutru și în final a fost uscat vid la temperatura de 100°C timp de 2 ore.

Sinteza compozitelor ZnO-CdS implică următoarele reacții chimice:

- i) $\text{Cd}(\text{NO}_3)_2 + \text{Na}_2\text{S} \rightarrow \text{CdS} \downarrow + 2\text{NaNO}_3$
- ii) $\text{Zn}(\text{NO}_3)_2 + 2\text{NaOH} \rightarrow \text{Zn}(\text{OH})_2 \downarrow + 2\text{NaNO}_3$



Caracterizarea compozitelor de ZnO-CdS

Probele investigate sunt notate astfel, ZnO; ZnO-CdS2%; ZnO-CdS5% si CdS.

Caracterizarea structurală a fost realizată prin difracție cu raze X (XRD) folosind un difractoru Bruker D8 Advance folosind radiația CuK α , un filtru de Ni Bruker AXS D8 Advance cu radiație CuK α ($\lambda=0.154$ nm).

Morfologia și compoziția probelor au fost investigate folosind un microscop electronic de baleiaj Zeiss Evo 50XVP (SEM) echipat cu un accesoriu de dispersie a razelor X (EDX) QUANTAX Bruker 200.

Starile chimice ale elementelor constitutive ale compozitelor sintetizate, au fost investigate prin spectroscopie de fotoelectroni cu raze X (XPS), măsurătorile fiind efectuate cu ajutorul unui spectrometru SPECS fotoelectron cu analizor PHOIBOS 150, sursa RX de tip Specs XR-50M operata pe anod de Al monocromatic ($E_x=1486.61\text{eV}$) la 300W, compensare sarcina cu flood gun de tip Specs FG15/40. Achizitia s-a facut cu un Pass Energy de 10eV pentru spectrele individuale si 50eV pentru spectrul general.

Proprietățile optice au fost investigate prin spectroscopie de reflexie. Spectrele de reflexie au fost înregistrate utilizând un spectrofotometru Perkin-Elmer Lamda 45 cu sfera integratoare.

Activitatea fotocatalitica a materialelor investigate a fost studiată cu ajutorul unui instrument ULVAC-RIKO PCC2 (ULVAC RIKO Inc.), utilizând albastru de metilen (MB), ca si colorant de testare care urmează să fie degradat [18]. După o procedură de curățare (sub iradiere UV), probele au fost impregnate cu o soluție apoasă de MB, uscat și apoi supus evaluării prin iradiere UV (la 368 nm). Descompunerea albastrului de metilen, ca urmare a reacției fotocatalitice sub iradiere UV, conduce la o reducere treptată a absorbției optice. Fotodegradarea se măsoară prin modificarea relativă a absorbanței optice. A fost utilizata aceeași suprafața de proba (1x2 cm²) pentru toate probele pentru a facilita compararea lor.

Rezulate si discutii

Probele au fost caracterizate structural prin XRD. Diagramele de difracție au fost înregistrate la temperatura camerei în geometrie Bragg-Brentano într-un unghi 2θ de la 20° la 80° cu o viteză de $0.6^\circ/\text{min}$ (2θ)/min. Difractogramele obtinute pe probele de ZnO, ZnO-CdS 2%, ZnO-CdS 5% si CdS sintetizate sunt prezentate in Figura 1. Difractograma probei de ZnO prezinta maxime principale la 31.8° , 34.7° , 36.3° , 47.6° , 56.6° , 62.9° , 66.4° , 67.9° și 69.1° carora le corespund indicii Miller ai planelor (100), (002), (101), (102), (110), (103), (200), (112) si (201).

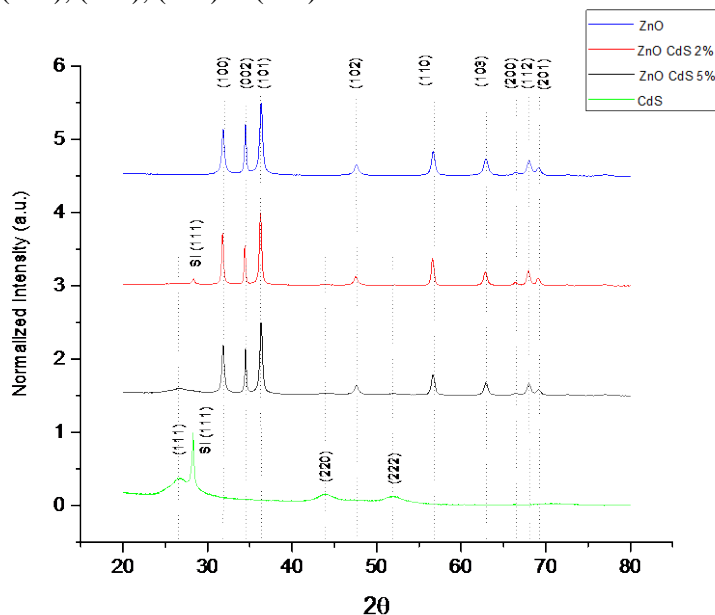


Figura.1 Difractograme XRD ale probelor investigate

Toate maximele de difracție observate sunt atribuite ZnO în fază hexagonală de wurtzite (fișier JCPDS nr. 89-0510) și confirmă obținerea de ZnO. Difractograma probei CdS prezintă maxime principale la 26.5°, 43.9° și 54.5° cărora le corespund indicii Miller ai planurilor (111), (220) și (222). Toate maximele de difracție observate sunt atribuite CdS în fază cubică cu fete centrate (fișier JCPDS nr. 89-0440) și confirmă obținerea de CdS. Difractogramele obținute pe probele de CdS pur și de ZnO-CdS2%, prezintă un maxim la $2\theta=28.3^\circ$, corespunde planului (111) al Si (pentru anumite probe a fost folosit ca substrat o placă de siliciu). Difractogramele obținute pe probele de compozite prezintă maxime asociate atât CdS, cât și ZnO. Lungimea de coerență cristalină ("Dimensiunea cristalitelor") de-a lungul axelor „a” și „c” a fost calculată din lățimea la semi-înălțime a maximelor de difracție corespunzătoare planurilor (100) și (002) folosind ecuația Scherrer [19], $D(nm) = 0.9 \cdot \lambda(nm) / \beta \cdot \cos \theta$, unde β este lățimea la semi-înălțime, θ este unghiul Bragg. Pentru calibrarea instrumentului și determinarea lățimii liniei produse de instrument a fost folosit un etalon de alumina (NIST SRM 1976). Folosind ec. Scherrer s-a estimat dimensiunea cristalitelor de CdS (CdS pur și compozite) ca fiind de ~5.3nm.

Prelucrarea datelor experimentale obținute prin difracție de raze X s-a făcut cu ajutorul aplicației "Bruker Diffracplus Basic Evaluation Package v.12".

Lungimea de coerență cristalină de-a lungul celor două direcții cristalografice precum și factorii de anizotropie de forma (D_{002}/D_{100}) sunt prezentate în tabelul 1. Din raportul D_{002}/D_{100} se poate deduce că în cazul compozitului ZnO-CdS5% cristalitele sunt mai alungite în lungul axei „c” în comparație cu cristalitele din compozitul ZnO-CdS2%.

Tabelul 1. Dimensiunea cristalitelor, factorii de anizotropie de forma (D_{002}/D_{100}).

Proba	Structura cristalină	D_{100} (nm)	D_{002} (nm)	D_{002}/D_{100}
ZnO	Hexagonal	29.4	49.8	1.69
ZnO-CdS2%	Hexagonal pentru ZnO Cubic pentru CdS	47.3	60.4	1.28
ZnO-CdS5%	Hexagonal pentru ZnO Cubic pentru CdS	32.7	65.1	1.99

Morfologia probelor sintetizate a fost direct observată prin SEM. În Figura 2 sunt prezentate imagini SEM ale structurilor sintetizate de ZnO, CdS și ZnO-CdS cu diferite concentrații de CdS.

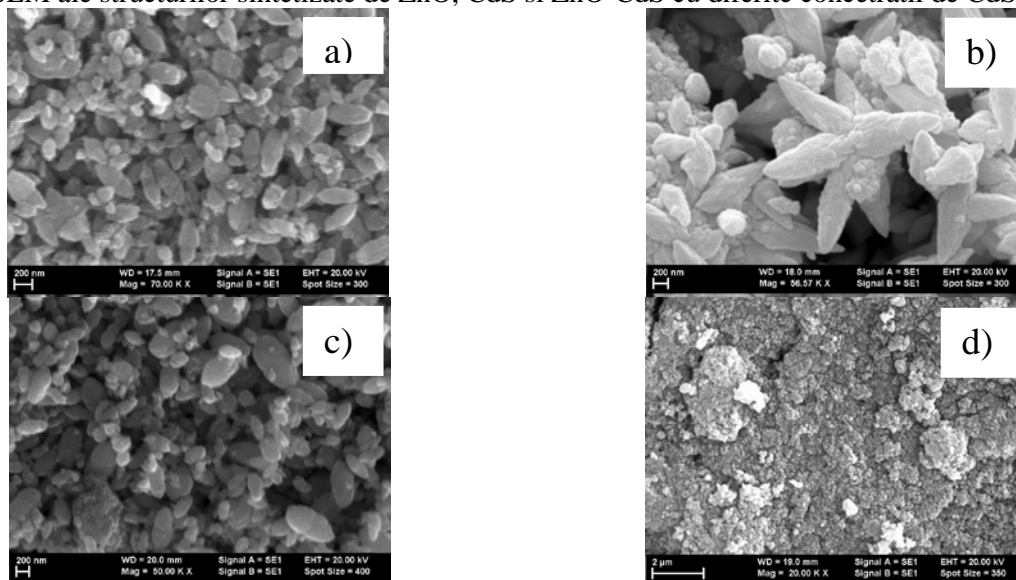


Figura 2. Imagini SEM ale: a) ZnO; b) ZnO-CdS2%; c) ZnO-CdS5%; d) CdS

Compoziția probelor a fost analizată cu ajutorul tehnicii EDX (figura 3). Din figura 3 se poate observa că materialele compozite sintetizate, ZnO-CdS2% și ZnO-CdS5% au o distribuție uniformă a elementelor chimice pe suprafața probelor.

În studiile de fotocataliză este importantă cunoașterea proprietăților de suprafață ceea ce a impus ca energia de legătură pentru Zn2p, O1s, Cd3d și S2p să fie investigată prin XPS.

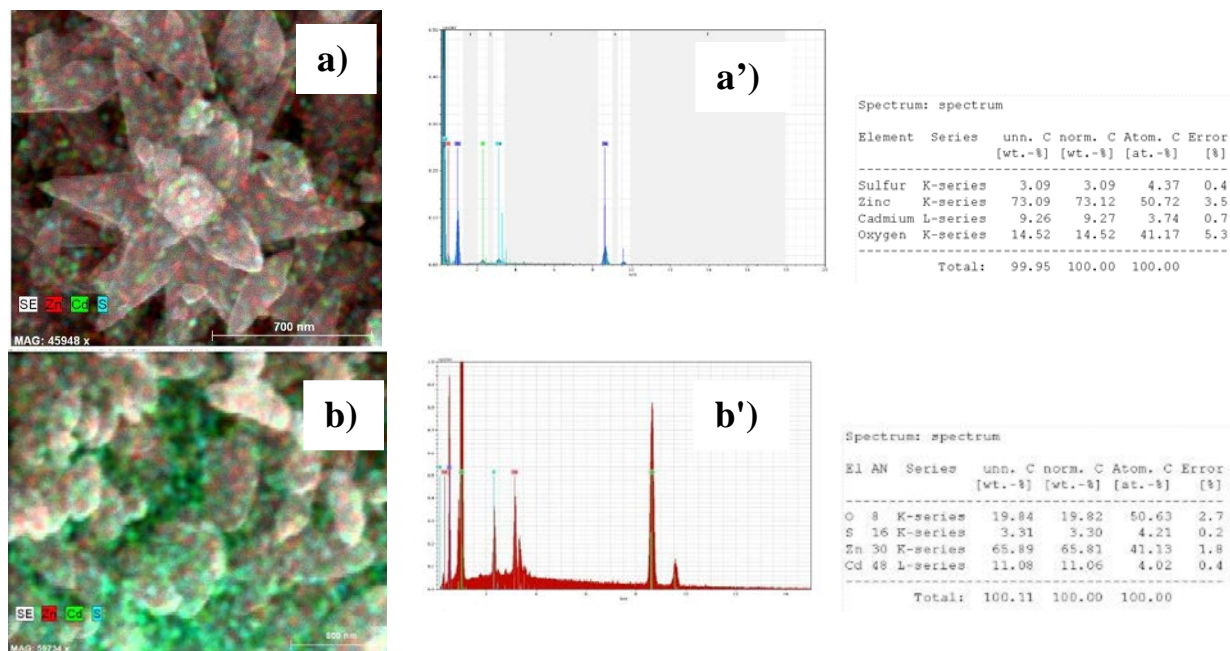


Figura 3. Hartile EDX si spectrele aferente pe: a, a') ZnO-CdS2% si b, b') ZnO-CdS5%

În acest sens pentru a determina stările chimice a elementelor, în materialele sintetizate, s-a efectuat o investigație prin spectroscopie fotoelectronică cu raze X (XPS) pe proba ZnO-CdS2%. Astfel, pentru compozitul ZnO-CdS2% au fost determinate stările chimice ale elementelor active. În Figura 4 sunt prezentate: spectrul general al probei de ZnOCdS2% (Figura 4a – în spectru pot fi identificate numai elementele C, Zn, O, Cd și S); spectrul Zn2p^{3/2} (Figura 4b – din care s-a obținut energia de legatură specifică a ZnO); spectrul Cd3d (Figura 4c – din care s-a obținut energia de legatură specifică CdS) și spectrul S2p₃ (Figura 4d – din care se observă că sulfurul are o energie de legatură specifică CdS).

Analiza XPS poate colecta informații cu privire la compozițiile atomice reprezentative pe suprafața probelor dar și din profunzime mergând până la 10nm [20]. Din valorile energiilor de legatură putem stabili că în compozitul investigat avem ZnO și CdS. Din analiza cantitativă a spectrului general pe proba ZnO-CdS2% avem următoarele concentrații de stări chimice (Tabelul 2).

Tabelul 2. Compoziția chimică rezultată din analiza XPS a compozitului ZnO-CdS2%.

Stări chimice	%
Zn2p ^{3/2}	34.9
O1s	51.1
C1s	6.4
Cd3d	2.7
S2p ₃	4.9

Maximul Cd3d^{5/2} cu energia de legatură de 405.156eV corespunde Cd²⁺ combinat cu S²⁻ [2]. Maximul S2p poate fi împărțit în două maxime centrate la 161.45 eV și 162.67 eV corespunzătoare sulfurului din -SH (n-SH) și CdS (n_{CdS}) [2].

Pentru a investiga proprietățile optice ale materialelor sintetizate au fost înregistrate spectrele de reflexie. Pe baza datelor de reflexie au fost estimate valorile benzilor de energie pentru ZnO și CdS ca fiind ~ 3,35eV și respectiv ~2.35eV (Figura 5). Valoarea benzii interzise pentru ZnO este în acord cu datele din literatura raportate pentru diferite morfologii ale ZnO (nanofire obținute prin oxidare termică a unei folii de Zn [21], sau prin metode hidrotermale [22]). Spectrele de reflexie ale compozitelor (ZnO-CdS 2% și ZnO-CdS5%) prezintă două praguri asociate ZnO și respectiv CdS. Astfel pentru ZnO valoarea benzii interzise a fost estimată la ~3.37eV (practic valoarea nu se schimbă în comparație cu proba de ZnO pur), iar pentru CdS valoarea benzii interzise este de ~2.7eV (banda interzisa fiind deplasată către energii mai mari (lungimi de undă mai mici) în comparație cu cea a probei de CdS pur). Această deplasare a benzii interzise corespunzătoare CdS din compozite poate fi pusă pe seama dimensiunilor reduse ale

nanoparticulelor de CdS [23]. Așa cum era de așteptat, ZnO absoarbe lumina în principal în domeniul de ultraviolet. Odată cu introducerea de CdS, limita de absorbție a fost extinsă la regiunea vizibilă (~450 nm), rezultat similar cu cele din literatura [2].

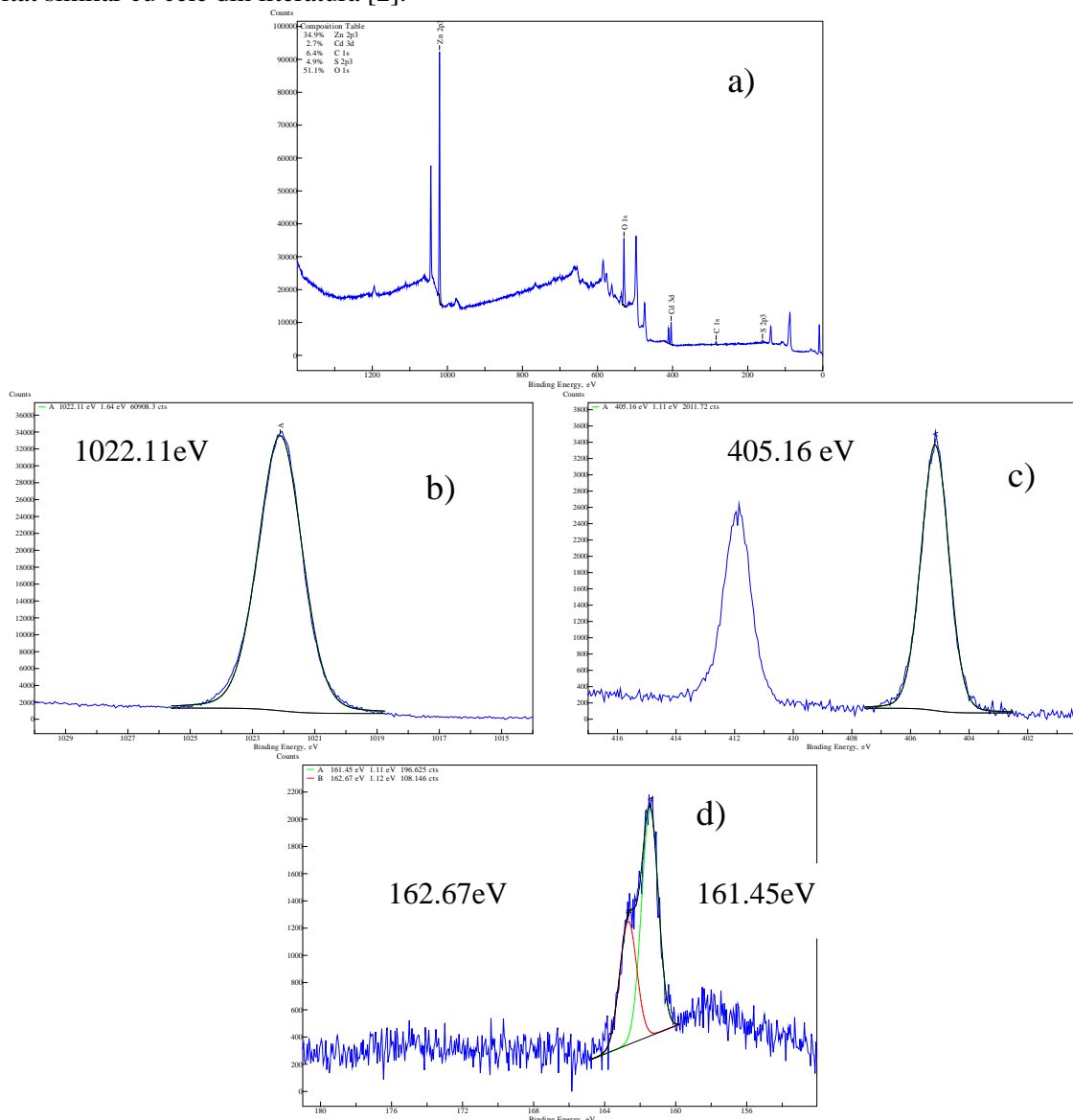


Figura 4. Spectrele XPS pe proba ZnO-CdS2% a) spectrul general; b) spectrul Zn2p^{3/2}; c) spectrul Cd3d; d) spectrul S2p3.

Pentru a investiga proprietățile fotocatalitice ale materialelor pure ZnO, CdS dar și ale compozitelor ZnO-CdS2% și ZnO-CdS5% s-a evaluat degradarea fotocatalitică a albastrului de metil sub iradiere UV pe parcursul a două ore (Figura 6).

Pronind de la rezultatele din literatura [24] a fost evaluată constanta de viteză de reacție k din fitarea curbelor experimentale cu funcții de scădere exponențială (suma de două exponențiale) $y = y_0 + A_1 \cdot e^{-(x-x_0)/t_1} + A_2 \cdot e^{-(x-x_0)/t_2}$ (Figura 7), constantele de viteză de reacție (A_1 , A_2), k_1 respectiv k_2 fiind prezentate în Tabelul 3. În particular, s-a căutat o fitare cu o funcție model de tip pseudo de ordinul 1. Cele mai bune rezultate s-au obținut folosind o sumă de două exponențiale descrescătoare ceea ce sugerează participarea la reacție a cel puțin două specii moleculare.

Conform cu studiilor anterioare [24] mecanismul descris de o sumă de două exponențiale $y = y_0 + A_1 \cdot e^{-(x-x_0)/t_1} + A_2 \cdot e^{-(x-x_0)/t_2}$ are loc în două etape:

- a) o fază rapidă care implică difuzia internă și externă urmată de
 b) o fază lentă controlată de difuzie intra-particulă.

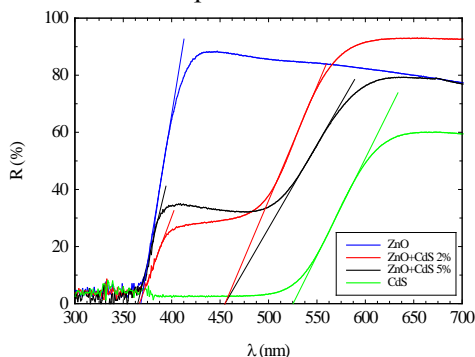


Figura 5. Spectre de reflexie pe probele investigate.

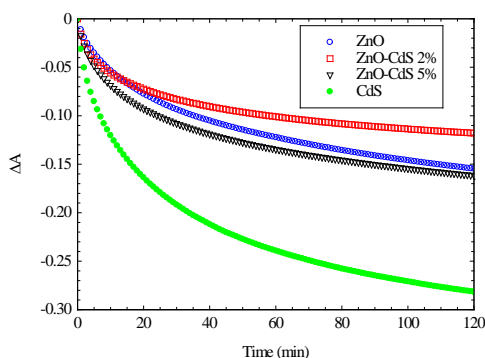
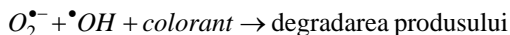
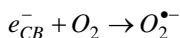
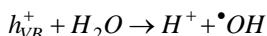
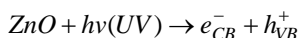


Figura 6. Curbele cinetice de fotodegradare catalitica a albastrului de metilen sub iradiere UV pe probele de ZnO, CdS și compozite de ZnO-CdS.

Cand ZnO este iradiat de lumina UV, pentru care energia fotonilor este mai mare decât energia benzii interzise, sunt generați electroni in banda de conducție si goluri in banda de valenta, pe suprafata ZnO. Golurile reactioneaza cu apa si formeaza radicali hidroxil foarte reactivi. Oxigenul capteaza electroni si se transforma in radicali anioni de tip superoxid. Colorantul se distruge prin actiunea directa a acestor radicali, asa cum se arata mai jos.



Tabelul 3. Constanta de viteza de reacție, k pentru nanostructurile sintetizate obtinuta prin fitarea cu o suma de doua exponentiale χ^2 - eroarea pătratică medie.

	ZnO	ZnO-CdS2%	ZnO-CdS5%	CdS
$k_1(\text{min}^{-1})$	0.05171	0.04342	0.06133	0.09003
$k_2(\text{min}^{-1})$	0.12797	0.07676	0.11102	0.19662
χ^2	$3.601 \cdot 10^{-7}$	$4.714 \cdot 10^{-7}$	$1.346 \cdot 10^{-7}$	$2.49966 \cdot 10^{-6}$

Dopajul ZnO cu CdS conduce la o reducere a benzii interzise, la o eliberare mai ușoară de electroni, la formarea de goluri și radicali liberi și de asemenea la degradarea mai buna a albastrului de metilen. Prin introducerea de nanostructuri de CdS in ZnO se formează o structură de bandă în cascadă [25]. Acest lucru ar putea reduce rata de recombinare din heterojonctiunea donor-acceptor și ar putea crește, de asemenea, absorbția solară, deoarece CdS are banda interzisa în domeniul vizibil (~2.4 eV). Mai

mult decât atât, excitonii fotogenerați produși în CdS vor genera mai mulți purtatori de sarcina, care ar trebui să contribuie, de asemenea la fotocurentul generat.

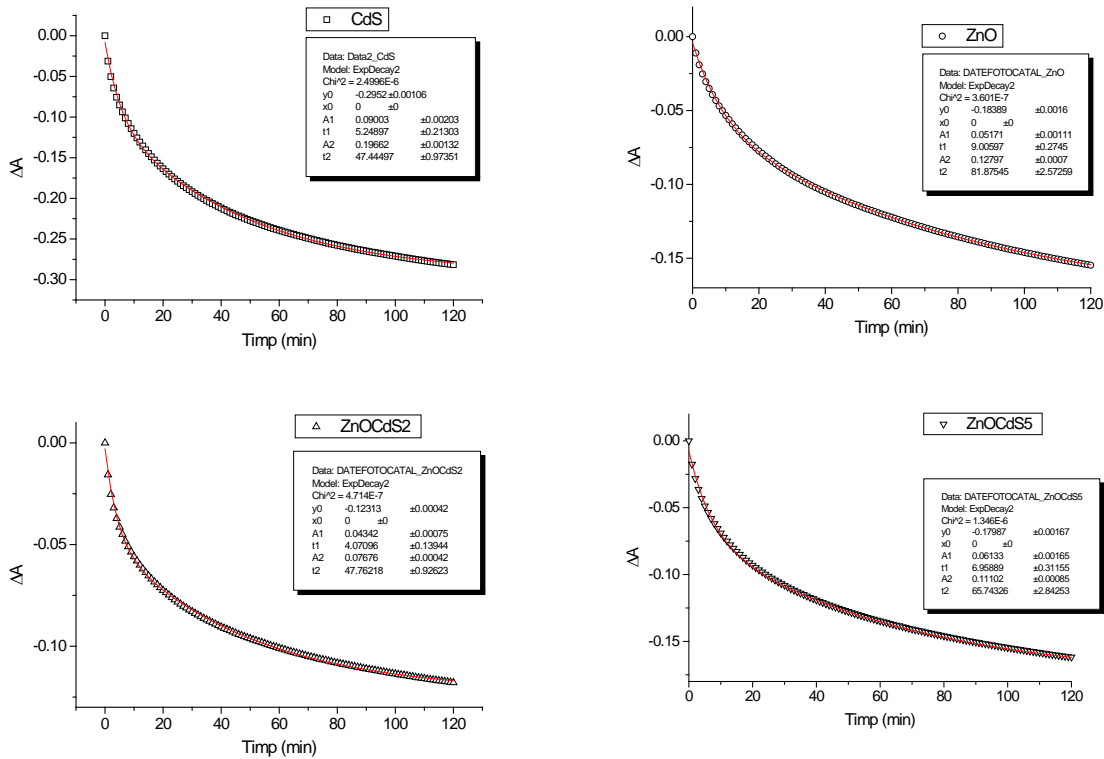


Figura 7. Exemplificare pentru fitarea curbelor cinetice de fotodegradare catalitica a albastrului de metilen. Catalizatorii sunt mentionati in legendele figurilor. Sunt folosite functii de scadere exponentiala de ordinul doi.

Prin comparatie cu rezultatele de activitate fotocatalitica a ZnO, s-a obtinut o performanța superioară a activității fotocatalitice a compozitelor ZnO-CdS5%, acest lucru poate fi atribuit heterostructurii dar și capacității largi de absorbție, care favorizează separarea fotoindusa (in prezenta oxigenului) de perechi electron-gol (Figura 8).

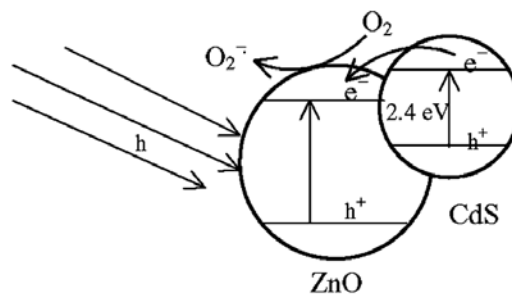


Figura 8. Principiul separării sarcinilor în sistemele de ZnO dopate cu CdS [26].

In general, creșterea activității fotocatalitice pentru ZnO-CdS, nanostructuri binare, se datorează suprimării recombinării perechilor electron-gol foto-generate dar și datorita îmbunătățirii absorbției luminii in domeniul vizibil [2].

Referinte:

- 1 Chun Cheng, Abbas Amini, Chao Zhu, Zuli Xu, Haisheng Song, Ning Wang, Scientific Report, 4, 4181 (2014)
- 2 Chienhua Chen, Zhengcao Li, Hehnan Lin, Guojing Wang, Jiecu Liao, Mingyang Li, Shasha Lv, Wei Li, Dalton Trans., 45, 3750-3758 (2016)
- 3 Plass, R.; Pelet, S.; Krueger, J.; Gratzel, M.; Bach, U. J. Phys. Chem. B 2002, 106, 7578–7580.
- 4 Kumar, A.; Jakhmola, A. Langmuir 2007, 28, 2915–2918.
- 5 Diguna, L. J.; Shen, Q.; Kobayashi, J.; Toyoda, T. Appl. Phys. Lett. 2007, 91, 023116-1–023116-3.
- 6 Leschkies, K. S.; Divakar, R.; Basu, J.; Enache-Pommer, E.; Boercker, J. E.; Carter, C. B.; Kortshagen, U. R.; Norris, D. J.; Aydil, E. S. Nano Lett. 2007, 7, 1793–1798.
- 7 Peter, L.M.; Wijayantha, K.; Riley, D. J.; Waggett, J. P. J. Phys.Chem. B 2003, 107, 8378–8381.
- 8 Zaban, A.; Micic, O. I.; Gregg, B. A.; Nozik, A. J. Langmuir 1998, 14, 3153–3156.
- 9 Chang, C. H.; Lee, Y. L. Appl. Phys. Lett. 2007, 91, 053503-1–053503-3.
- 10 Tachibana, Y.; Akiyama, H. Y.; Ohtsuka, Y.; Torimoto, T.; Kuwabata, S. Chem. Lett. 2007, 36, 88–89.
- 11 Nozik, A. J. Physica E 2002, 14, 115–120.
- 12 Zhai, T. Y.; Fang, X. S.; Bando, Y.; Dierre, B.; Liu, B. D.; Zeng, H. B.; Xu, X. J.; Huang, Y.; Yuan, X. L.; Sekiguchi, T.; Golberg, D. Adv.Funct. Mater. 2009, 19, 2423–2430.
- 13 Zhang, M.; Zhai, T. Y.; Wang, X.; Liao, Q.; Ma, Y.; Yao, J. N. J. Solid State Chem. 2009, 182, 3188–3194.
- 14 Mondal, S. P.; Ray, S. K. Proc. Natl. Acad. Sci. India, A 2012, 82, 21–29.
- 15 Mondal, S. P.; Ray, S. K. Appl. Phys. Lett. 2009, 94, 223119-1–223119-3.
- 16 Fang, F.; Zhao, D. X.; Li, B. H.; Zhang, Z. Z.; Zhang, J. Y.; Shen, D. Z. Appl. Phys. Lett. 2008, 93, 233115-1–233115-3.
- 17 Wang, X.; Liu, G.; Lu, G. Q.; Cheng, H.-M. Int. J. Hydrogen Energy 2010, 35, 8199–8205.
- 18 A. Houas, H. Lachheb, M. Ksibi, E. Elaloui, C. Guillard, J.-M. Herrmann, Appl. Catal. B: Environmental, 2001, 31, 145.
- 19 A. Patterson, The Scherrer formula for X-ray particle size determination, Phys. Rev. 1939 56, 978–982.
- 20 C. Especel, D. Duprez, F. Epron F., Comptes Rendus Chimie 2014, 17, 790
- 21 C. Florica, N. Preda, A. Costas, I. Zgura, I. Enculescu, Materials Letters, 2016, 170, 156–159
- 22 L.V. Podrezova, S. Porro, V. Cauda, M. Fontana, G. Cicero, Appl. Phys. 2013, A113, 623-632.
- 23 R Banerjee, R Jayakrishnan, P Ayyub, J. Phys.: Condens. Matter., 2000, 12, 10647–10654.
- 24 A. Wilezak, T. M. Keinath, Wat. Environ. Res., 1993, 65, 238–244.
- 25 Spoerke, E. D.; Lloyd, M. T.; McCready, E. M.; Olson, D. C.; Lee, Y.-J.; Hsu, J. W. P. Appl. Phys. Lett. 2009, 95, 213506-1–213506-3.
- 26 S. Sakthivel, S.-U. Geissen, D.W. Bahnemann, V. Murugesan, A. Vogelpohl, J. Photochem. Photobiol. A-Chem. 2002, 148, 283–293

6. Rezultate, stadiul realizării obiectivului fazei, concluzii și propuneri pentru continuarea proiectului (se vor preciza stadiul de implementare a proiectului, gradul de indeplinire a obiectivului cu referire la tintele stabilite și indicatorii asociați pentru monitorizare și evaluare).

In concluzie in cadrul fazei, au fost realizate urmatoarele rezultate:

- S-au obtinut sisteme de oxizi metalici de tranzitie cu decoratii, ZnO decorat cu nanoparticule de CdS.
- Sistemele obtinute au fost investigate dupa fiecare pas al sintezei prin UV-Vis, XRD, SEM, XPS pentru o cat mai buna caracterizare morfologica si structurala; de asemenea prin degradarea albastrului de metil s-au evidentiat performantele fotocatalitice ale heterostructurilor obtinute.
- S-au modificat condițiile de sinteza, concentratia de CdS, astfel au fost imbunatatite performantele fotocatalitice ale heterostructurilor de ZnO-CdS obtinute.

Diseminarea rezultatelor

Pe baza rezultatelor obtinute in cadrul prezentei faze, au fost redactate lucrari care au fost prezentate pentru evaluare in vederea publicarii:

1. Wet chemical synthesis of ZnO-CdS composites with enhanced photocatalytic activity

G. Socol, I. Zgura*, N. Preda, L. Frunza, L. Diamandescu, M. Enculescu, L. Nedelcu, C. P. Ganea, S. Frunza

A fost acceptat ca poster la 10th International Conference on Photoexcited Processes and Applications”, August 29 – September 2, 2016, Brasov, Romania (“ICPEPA-10”).

2. Wet chemical synthesis of ZnO-CdS composites with enhanced photocatalytic activity

I. Zgura*, N. Preda, L. Diamandescu, G. Socol, L. Frunza, M. Enculescu, C. P. Ganea, L. Nedelcu, S. Frunza

Va fi trimisa ca articol la Applied Surface Science in timpul conferintei ICPEPA-10

Prevederile prezentei faze au fost indeplinite in totalitate.

Responsabil proiect

Dr. Sorina Lazanu

Responsabil faza

Dr. Irina Zgura

Dr.Ligia Frunza