

Contractor: INCDFM

Cod fiscal: 9068280

PROPUNERE PROIECT COMPONENT
PC3

(Structura cadru - document: margini 2 cm, 1,2 randuri, font arial 11p)

Denumirea Programului Nucleu: Noi dezvoltări în domeniul materialelor avansate cu potențial aplicativ, în corelare cu provocările societale și domeniile de specializare inteligentă (MAVPA-PROSOCSPIN)

Denumirea obiectivului: Dezvoltarea de noi formule, arhitecturi și soluții pentru surse regenerabile de energie și stocarea energiei sub diverse forme.

Domeniul și subdomeniile de specializare inteligentă/politici publice cărora li se adresează propunerea de proiect:

OS1.5. domenii de provocări societale „Climă, energie și mobilitate” (impacturi: **Tranziția sectorului energie către neutralitate și reziliență climatică; Către o mobilitate neutră și reziliență din punct de vedere climatic și prietenoasă cu Mediul);**

OG2-domenii de specializare inteligentă

3.1 Mobilitate verde;

3.2 Tehnologii moderne de generare a energiei cu emisii scăzute sau zero;

3.4 Stocarea energiei;

5.6 Materiale pentru energie

Tipul activității de cercetare – dezvoltare, inovare și demonstrare¹: cercetare fundamentală, dezvoltare experimentală, cercetare industrială

Rezumatul Propunerii de proiect (max ½ pagină):

Criza energetică fără precedent pe care o traversăm în zilele noastre necesită acțiuni concrete din partea cercetătorilor pentru a găsi soluții viabile cât mai curând posibil. Mai mult decât atât, ca urmare a pactului european „Green Deal”, Comunitatea Europeană a adoptat obiective ambițioase de neutralitate climatică până în 2050 și o reducere netă de 55% a emisiilor de CO₂ până în 2030, comparativ cu 1990. Astfel că, pentru a răspunde acestor provocări internaționale principalul scop al proiectului este de a dezvolta noi formule, arhitecturi și soluții pentru surse regenerabile de energie și stocarea energiei sub diverse forme. Obiectivele specifice ale PC3 sunt: (i) sinteza și design-ul de

¹ Se menționează tipul/tipurile de cercetare – dezvoltare, inovare și demonstrare în conformitate cu Regulamentul UE nr. 651/2014 al Comisiei de declarare a anumitor categorii de ajutoare compatibile cu piața internă, în aplicarea art. 107 și 108 din Tratat (www.renascce.eu/documente/Exceptari_2014_ro_863ro.pdf)

materiale și heterostructuri pentru producerea de energie din surse regenerabile: celule fotovoltaice, dispozitive termoelectrice, hidrogen produs în reactoare solare; (ii) recoltarea și reciclarea de energie din diverse surse care produce energie mecanică, termică sau de altă natură, către soluții moderne pentru stocarea energiei, cum ar fi producerea de supercapacitori și noi electrozi pentru baterii; (iii) soluții pentru transformarea gazelor cu efect de sera în combustibili utili prin procese de (foto)-cataliză. Astfel, va fi realizată reducerea CO_2 la CH_4 sau CH_3OH , dar și reducerea N_2 cu formare de amoniac, ca vector de energie.

Planul de lucru al PC3 este organizat pe 4 ani în 9 tematici de lucru care cuprind 40 de faze de cercetare. Echipa de cercetare a proiectului este formată din cercetători cu experiență în domeniile PC3 care garantează fezabilitatea proiectului. Prin dezvoltarea soluțiilor propuse PC3 va avea atât un impact științific, economico-social cât și de mediu.

1. Descrierea științifică (maxim 15 pagini)

1.1. Prezentarea scopului proiectului

(se vor descrie rezultatele ce urmează a fi obținute (modele teoretice, modele experimentale, produse, tehnologii, servicii, soluții, etc) în corelare cu țintele propuse)

Conform Agenciei Internaționale pentru Energie, la nivel global, cererea de energie crește galopant în ciuda progreselor în materie de eficiență energetică și a unei reduceri semnificative a intensității consumului de resurse energetice.^{1,2} 80% din energia consumată la nivel mondial provine din surse de tip combustibili fosili, 18% din surse regenerabile (cu doar 4% energie provenită din surse hidro, vânt sau solar). 74% din energia consumată de industria globală este energie termică, cu doar 4% provenind din surse regenerabile. Pentru atingerea țintelor stabilite în cadrul planului european de reducere a emisiilor de dioxid de carbon și a altor gaze cu efect de seră, procentul energiei regenerabile produse și consumate la nivel mondial ar trebui să crească exponențial până în 2030. Astfel că, mobilizarea cercetătorilor pentru a dezvolta soluții inovatoare în domeniul energetic în acord cu obiectivele din cadrul domeniilor de specializare inteligentă este esențială.

Mai mult decât atât, impulsionați și de criza energetică actuală, **scopul principal al Proiectului Component 3 (PC3) este de a dezvolta materiale, soluții și tehnologii sustenabile pentru a produce, stoca și recicla energie curată și regenerabilă.** Scopul proiectului este în concordanță cu politicile și strategiile la nivel european și național și răspunde recomandărilor din raportul experților europeni PSF(Policy Support Facility) redactat în 2022.

PC3 este articulat pe două direcții de studiu, organizate în 38 de faze distribuite pe 4 ani și prezentate în schema de realizare și în acord cu țintele propuse în PN, care vor conduce la următoarele tipuri de rezultate:

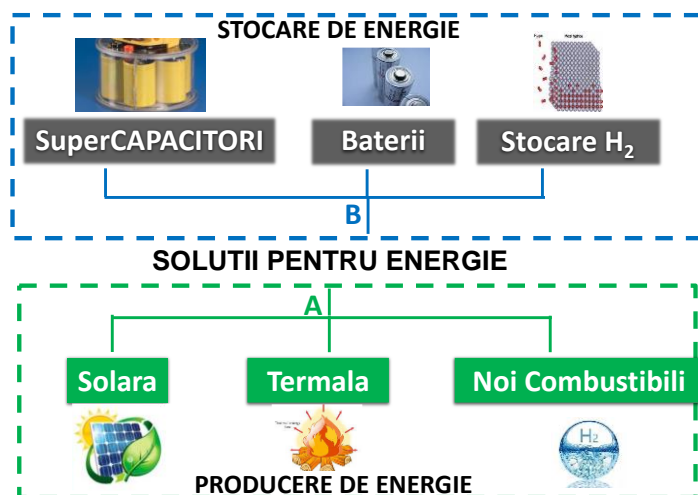
- A) Dezvoltarea de materiale și structuri pentru **producerea de energie din surse regenerabile**. Aceasta direcție va avea ca rezultate producerea de dispozitive fotovoltaice pe arie mică dar și arie mare cu eficiențe ridicate și stabile, dezvoltarea de materiale, tehnologii și concepte pentru dispozitive termoelectrice în vederea creșterii eficienței energetice, dar și metodologii pentru producerea de hidrogenului din apă ca sursă pentru producerea de energie verde.
- B) **Soluții moderne pentru stocarea energiei**, astfel la sfârșitul proiectului vom putea livra materiale cu capacitate de stocare de hidrogen ridicată dar și supercapacitori în stare solidă cu eficiență ridicată obținută prin ingineria structurilor multistrat.

1.2. Prezentarea obiectivelor proiectului

(se vor avea în vedere următoarele: corelarea și contribuția la obiectivele stabilite în propunerea de Program Nucleu, gradul de originalitate și noutate al propunerii față de situația curentă în domeniu la nivel național și internațional, țintele propuse a fi atinse, fezabilitatea proiectului)

Principalul scop al proiectului este de a dezvolta noi formule, arhitecturi și soluții pentru surse regenerabile de energie și stocarea energiei sub diverse forme așa cum este menționat și în Programul Nucleu (PN), PN-OS3 și ilustrat în Schema 1.

Pentru realizarea scopului principal, PC3 își propune atingerea mai multor obiective/ținte specifice în strânsă legătură cu direcțiile strategice de cercetare din Planul Strategic de dezvoltare al INCDFM și prevăzute în Schema de Realizare.



Schema 1. Direcțiile de cercetare ale proiectului component 3 (PC3)

Astfel, obiectivele PC3 corespund următoarelor direcții strategice de cercetare: direcția 1b; direcțiile 2c și 2d; direcțiile 3a și 3c; direcțiile 4, 5, 6a și 6b; direcțiile 7c și 7d.

Mai precis, cercetarea din PC3 va fi focalizată pe următoarele ținte:

- sinteza și design-ul de materiale și heterostructuri pentru producerea de energie din surse regenerabile: celule fotovoltaice, dispozitive termoelectrice, hidrogen produs în reactoare solare; **(direcția 1b, direcțiile 2c și 2d, direcțiile 3a și 3c)**
- recoltarea și reciclarea de energie din diverse surse care produce energie mecanică, termică sau de altă natură, către soluții moderne pentru stocarea energiei, cum ar fi producerea de supercapacitori și noi electrozi pentru baterii; **(direcții 4, 5, 6a și 6b, direcțiile 7c și 7d)**
- soluții pentru transformarea gazelor cu efect de seră în combustibili utili prin procese de (foto)-cataliză. Astfel, va fi realizată reducerea CO₂ la CH₄ sau CH₃OH, dar și reducerea N₂ cu formare de amoniac, ca vector de energie. **(direcția 1b, direcția 2a)**

Originalitatea PC3 este articulată pe mai multe componente și este prezentată în corelare cu situația curentă a domeniului la nivel național și internațional :

1) dezvoltarea de materiale noi folosind tehnici de preparare prietenoase cu mediul, necesare pentru generarea și stocarea de energie verde. Astfel, în cadrul PC3 resurse importante vor fi dedicate acestui studiu, mai precis vor fi studiate diferite materiale fotoabsorbante folosite pentru fabricarea de celule solare precum: **perovskiți hibridi cu o inginerie compozițională nouă (PSC)**, **kesterite** de tipul Cu₂ZnSnS₄ (CZTS) sau **nanocompozite hibride optic active de tip ion metalic/nanomaterial carbonic fluorescent [Mn⁺/NCF]**, capabile să absoarbă eficient un spectru larg de radiație solară și convertirea eficientă a acesteia în energie verde. Materialele 2D, reprezintă soluții originale pentru realizarea straturilor active în structura celulei solare și/sau a stratului buffer între TCE și stratul fotoactiv.³ De asemenea, heterostructurile van der Waals între diferite dicalcogenuri ale metalelor de tranziție sau între o dicalcogenură a unui metal de tranziție și grafenă (G)⁴ au proprietăți neobișnuite și prezintă fenomene fizice noi care vor fi exploatate pentru aplicații în stocarea energiei și în dispozitive fotovoltaice. Astfel, **heterostructuri inovative cu grafenă** vor fi utilizate în fabricarea filmelor subțiri transparente conductoare (TCE) cu aplicație în celule solare, iar caracterul ambipolar al transportului de sarcină va permite utilizarea acesteia atât ca anod cât și ca catod.⁵ Bateriile primare sau secundare pe bază de ioni de sodiu și potasiu (NIB, *K-ion battery*, KIB) sunt considerate unele dintre cele mai promițătoare alternative la bateriile pe baza de ioni de Li (LIB)

pentru tehnologiile de stocare a energiei la scara industrială.⁶ Identificarea de materiale adecvate pentru fabricarea de electrozi cu o suficientă performanță electrochimică reprezintă o provocare semnificativă deoarece ionii de Na^+ / K^+ au raze ionice mai mari decât Li^+ , conducând la o capacitate specifică și rată de descărcare mai mici în raport cu LIB. În prezent, efortul se concentrează pe dezvoltarea și optimizarea de materiale pentru electrozi ieftine și cu performanță ridicată. Oxizii metalelor tranziționale cu structura stratificată sunt intens investigați ca materiale pentru catozii bateriilor NIB/KIB.^{7,8} Astfel, pentru prima dată în România, vor fi sintetizați noi compuși micști cu structura stratificată pentru baterii cu ioni alcalini și vor fi folosite noi metode de caracterizare corelativă a proprietăților microstructurale și funcționale la scară nanometrică⁹ prin microscopie electronică *in situ* și *operando* la temperatura variabilă sau sub polarizare electrică; noi metode de preparare FIB a lamelelor subțiri pentru observații TEM *in situ* și *operando*. În toate sintezele propuse se va urmări utilizarea de reactivi netoxici, pentru a livra metode verzi de obținere de materiale. Proiectul își propune de asemenea dezvoltarea și selectarea unor materiale termoelectrice (TE) cu proprietăți compatibile cu astfel de aplicații, definirea unor noi concepte de dispozitive TE capitalizând posibilitățile de design bazate pe simulări numerice, precum și dezvoltarea unor tehnologii scalabile pentru producția de masa a unor dispozitive GTE pornind de la aceste materiale și concepte de design. Pentru îmbunătățirea performanțelor TE sunt propuse **2 abordări complementare cu grad mare de noutate:** i) utilizarea unor metode de inducere a convergenței benzilor de energie prin substituții, și ii) prin formarea acestora în urma unor tratamente termice din compoziția unor aliaje HEA.

2) elaborarea de soluții moderne pentru stocarea de energie. Electricitatea este o formă de energie extrem de versatilă, dar are un mare dezavantaj: este relativ greu de stocat! Bateriile pot stoca cantități mari de energie, dar încărcarea lor durează ore întregi.¹⁰ Capacitorii, pe de altă parte, se încarcă aproape instantaneu, dar stochează doar cantități mici de energie. Când vrem să stocăm și să eliberăm cantități mari de energie electrică foarte rapid, apelăm la supercapacitori. Un efort enorm din partea cercetătorilor este investit pentru îmbunătățirea acestor posibilități de stocare, iar INCDFM este implicat și deține expertiza în acest domeniu.¹¹ În PC3 sunt propuse noi abordări pentru creșterea performanțelor capacitorilor în stare solidă și anume dezvoltarea unor structuri multistrat cu proprietăți electrice diferite: polarizare, constantă dielectrică, rezistivitate, acestea pot induce câmpuri interne mari în straturile feroelectrice.^{12,13} Aceasta nouă abordare ar putea determina creșterea constantei dielectrice, creșterea rezistenței la câmpuri electrice mari și deplasarea curbelor de PV de-a lungul axei tensiunii.¹¹ De asemenea, grafena¹⁴ și dicalcogenurile metalelor de tranziție oferă un potențial deosebit pentru aplicații în domeniul supercapacitorilor⁴ datorită structurii de banda ajustabile, stabilității proprietăților fizice și chimice și mobilității purtătorilor de sarcină, cu câteva ordine de mărime mai mare decât cea din semiconductorii organici. Aceste studii vor avea un impact semnificativ în creșterea parametrilor importanți în domeniul stocării de energie în capacitori precum energia de stocare și eficiența și creșterea câmpului de străpungere, fără a crește timpul de descărcare. În aceeași direcție de cercetare, de a găsi soluții pentru stocarea energiei, în cadrul PC3 va fi studiată și stocarea de energie sub forma de H_2 . Stocarea H_2 , care este văzut drept combustibilul viitorului datorită capacității energetice masice și volumetrice mari furnizate fără evacuarea de produși toxici în mediul înconjurător, reprezintă o problemă stringentă având în vedere deteriorarea climatică și epuizarea combustibililor fosili.¹⁵⁻¹⁸ Materialele propuse în acest studiu sunt sisteme inovatoare de hidruri complexe cu cationi sau anioni micști $\text{LiH-Mg}(\text{BH}_4)_2\text{-Ca}(\text{BH}_4)_2$, $\text{LiBH}_4\text{-NaZn}(\text{BH}_4)_3$ sau $\text{LiBH}_4\text{-NaZn}_2(\text{BH}_4)$, $\text{MgH}_2\text{-NaBH}_4$, $\text{LiNH}_2\text{-MgH}_2\text{-M}(\text{BH}_4)_n$ ($\text{M}=\text{Na, Ca, etc.}$), iar grupul din INCDFM este printre singurele la nivel național care aprofundează acest subiect.¹⁵⁻¹⁸

3) găsirea de soluții la criza energetică actuală. În ultimele două secole, nevoile de energie au crescut vertiginos, în special din cauza sectoarelor de transport și industrie, iar combustibilii fosili sunt poluanți și rezervele lor sunt limitate. Astfel că PC3 vine cu soluții originale, cum ar fi dezvoltarea

de celule fotovoltaice (materiale pe baza de perovskiti hibridi (PSC) sau kesterite^{19,20}) și ușor de preparat sau producerea de H₂ sau NH₃, ca vectori de energie, prin splitarea fotocatalitică a apei și respectiv, prin reducerea N₂. Strategiile abordate până în prezent în vederea creșterii performanțelor PSC au vizat ingineria compozițională a perovskitului hibrid (HP) de referință, MAPbI₃, respectiv înlocuirea/doparea cationului organic MA și a anionului de halogen;^{21,22} dar toate aceste studii au fost făcute pe celule de arie mică depuse cu tehnici de laborator. În ceea ce privește celulele pe baza de kesterit sunt propuse materiale noi pe baza de Sb cu potențial aplicativ, care pot fi raportate pentru prima dată la nivel mondial. Cu toate eforturile comunității științifice internaționale, din ultimii ani, celulele solare pe bază de perovskit hibrid sau de kesterit CZTS nu au depășit o eficiență de conversie mai mare de 25% sau respectiv 12%, valori insuficiente pentru eventuala industrializare a acestora, dar cel mai important dezavantaj este ca nu sunt stabile! În cadrul PC3 cercetările propuse privesc îmbunătățirea stabilității în timp a performanțelor PSC prin inginerie compozițională a straturilor de ETM (electron transportor material) și HP din structura PSC, folosind tehnici de depunere aplicabile pe arii mari. În ceea ce privește H₂, acesta este considerat de multă vreme o componentă cheie în producerea energiei curate din punct de vedere al emisiei de CO₂ și eforturi considerabile au fost investite pentru producerea acestuia din resurse regenerabile. Acesta poate fi generat din apă utilizând fotocataliza. În câteva cuvinte, fotocataliza poate fi descrisă ca accelerarea unei fotoreacții în prezența unui catalizator, numit fotocatalizator, care în urma fotoexcitării creează perechi electron-gol care mai apoi migrează la suprafața externă și inițiază reacții simultane de oxidare și reducere.^{23,24} În cadrul acestui proces, obstacolul major care trebuie depășit este recombinarea electronilor și a golurilor fotogenerate. În acest sens, combinarea MXenelor cu diverși fotocatalizatori semiconductori a condus la o creștere semnificativă a fotoactivității.^{25,26} În cadrul acestui studiu ne propunem, de asemenea, să dezvoltăm o tehnologie avansată pentru producerea de H₂ din apă cu eficiențe ridicate folosind noi sisteme fotocatalitice, compozite 2D și/sau 3D. Ca materiale 2D vor fi utilizate MXene și/sau oxycarburi pe bază de Ti (TiCO) materiale sintetizate pentru prima dată în anul 2021,²⁷ iar ca 3D, materiale pe bază de TiO₂. Este important de precizat faptul că, la nivel global și având la baza un screening al literaturii de specialitate din ultimii 5 ani, **aceste compozite nu au fost folosite în reacția de splitare fotocatalitică a apei, acest aspect constituind originalitatea absolută a acestui studiu.**

Fezabilitatea PC3: Deși PC3 este, în mare măsură, un proiect *high risk-high gain*, fezabilitatea proiectului este asigurată deoarece riscurile au fost identificate și pot fi reduse în mod semnificativ prin planul de combatere elaborat și prezentat în Secțiunea 3. De asemenea, expertiza echipei de cercetare garantează fezabilitatea proiectului, aceștia având competențe atât în preparare de noi materiale, în metode de caracterizare prin diferite tehnici *in situ* și *operando* cât și în dezvoltarea de noi procese pentru diferite aplicații pentru generare și stocare de energie. Mai mult decât atât, INCDFM dispune de toată infrastructura necesară derulării proiectului și prezentată în 1.3.

1.3. Contribuția științifică și tehnică, metodologia de implementare

(se vor avea în vedere: noutatea soluțiilor propuse în proiect, prezentarea metodologiei de cercetare - descrierea fazelor și activităților necesare atingerii obiectivelor proiectului, diagrama GANTT, milestones, prezentarea infrastructurii existente pentru realizarea proiectului, dezvoltarea infrastructurii dacă este necesar pentru realizarea proiectului, aspecte de etică acolo unde este cazul).

Planul de lucru al PC3 este structurat pe 4 ani de zile în **40 de faze** prezentate în Schema de Realizare, grupate la rândul lor **9 tematici de lucru (TL)**, care se succed într-o ordine logică, și cărora le corespund 53 de ținte. Descrierea TL și a fazelor precum și a metodologiei acestora sunt prezentate pe cele două direcții de studiu propuse (Schema 1): producerea și stocarea de energie.

A. Producerea de energie din surse regenerabile

T.L.3.1. Inginerie compozițională a perovskitelor hibridi (HP) și strat transportor de electroni pentru celule solare de arie mare. Identificarea de soluții pentru stoparea mecanismelor de degradare sunt subiecte fierbinți în cercetarea actuală. Cercetările propuse în acest proiect privesc îmbunătățirea stabilității în timp a performanțelor PSC prin inginerie compozițională a straturilor de ETM și HP din structura PSC, folosind tehnici de depunere aplicabile pe arii mari.

F3.1.1. (2023) Optimizare proprietăți straturi ETM compact/mezoporos pe bază de TiO_2 , SnO_2 și TiO_2 dopat cu r-GO depuse prin metode de arie mare. **Metodologie:** Sinteza de perovskiti obținuți prin ingineria compozițională propusă, caracterizare structurală (XRD, SEM, AFM, XPS), realizare de celule solare, caracterizare electrică și fotoelectrică (spectroscopie de impedanță, EQE, PCE), comparație cu alte compoziții de HP obținute în laborator.

F3.1.2. (2024-2025) Sinteza și caracterizare halizi perovskiti obținuți prin inginerie compozițională. Realizare și testare preliminară PSC-uri. **Metodologie:** Sinteza de perovskiti obținuți prin ingineria compozițională propusă pe straturi de ETM optimizate în activitatea A1, caracterizare structurală (XRD, SEM, AFM, XPS), realizare de celule solare, caracterizare electrică și fotoelectrică (spectroscopie de impedanță, EQE, PCE), comparație cu alte compoziții de HP obținute în laborator.

F3.1.3. (2026) Studii de stabilitate a PSC-urilor obținute prin inginerie compozițională, identificare compoziții de HP cu cele mai stabile performanțe fotovoltaice. Studii de stabilitate a performanțelor în timp a PSC-urilor obținute la activitatea **F3.1.2**. **Metodologie:** Aceste studii au la bază urmărirea schimbărilor care apar în compoziția/structura perovskitelor sintetizați (prin măsurători XRD, SEM, AFM, XPS) și în proprietățile electrice și fotoelectrice ale PSC-urilor fabricate cu perovskiti obținuți prin inginerie compozițională (prin măsurători de spectroscopie de impedanță, EQE, PCE), în diferite condiții de operare (atmosferice, lumină, temperatură și timp).

Caracter de noutate: (i) dezvoltarea de tehnici și proceduri de depunere pe arii mari, electrochimice și chimice, a ETM compact/mezoporos pe bază de TiO_2 , SnO_2 și rGO (ii) ingineria compozițională a cationilor organici consacrați (MA, FA) cu compuși de tip lichid ionic cu lanțuri alchilice diferite (butylimidazolium, n-hexylimidazolium, alkyldiamonium, și a anionilor halogeni (I, Cl, Br) cu compuși non-halogen de tipul $(\text{HCOO})^-$, $(\text{BH}_4)^-$, $(\text{BF}_4)^-$, $(\text{PF}_6)^-$; (iii) dezvoltarea tehnicilor și procedurilor de depunere pe arii mari a noilor compozițiilor de HP menționate mai sus.

Milestones 3.1: Protocol de sinteză și depunere a materialelor; celule solare cu eficiențe ridicate și stabile

T.L.3.2. Soluții verzi de sinteză de nanocristale cuaternare chalcogenice și de nanomateriale carbonice fotoluminescente hibride (NCF) cu aplicații în energie.

F3.2.1. (2023) Realizarea tehnologiei de producere, elaborarea rețetelor de sinteză și caracterizarea de nanoparticule $\text{Cu}_2\text{Zn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{SnS}_4$. Obținere de pelicule și celule test fotovoltaice. **Metodologie:** Sinteza nanoparticulele de CFTS și CZTS prin metoda *hot injection*, filtrarea acestora, caracterizare structurală (XRD, Raman, TEM) și de compoziție (XPS) înainte și după tratamente termice în atmosferă inertă, realizarea coloizilor în solvenți polari și folosind agenți de stabilizare cu temperatură mică de fierbere, testarea proprietăților electrice (van der Pauw, Hall) pe filme depuse pe cuarț. Sinteza coloizilor cu parametri optimizați a unei serii $\text{Cu}_2\text{Zn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{SnS}_4$. Realizarea și evaluarea celulelor test fotovoltaice, sticlă $\text{Mo/Cu}_2\text{Zn}_{1-x}\text{Fe}_x\text{SnS}_4/\text{CdS}(\text{ZnS})/\text{ZnO}/\text{ITO}$.

F3.2.2. (2024) Obținerea de coloizi cu compoziție a nanoparticulelor cu substituție a Sn cu Sb. Evaluarea compatibilității și funcționalității ca strat absorbant de lumină în celule solare. **Metodologie:** Sinteza nanoparticulele CFSbS și CZSbS și obținerea de coloizi. Caracterizare structurală (XRD, spectroscopie Raman, TEM) și de compoziție (XPS). Testarea proprietăților electrice (van der Pauw, Hall). Evaluarea eficienței celulelor fotovoltaice, sticlă $\text{Mo/chalcogen cuaternar/CdS}(\text{ZnS})/\text{ZnO}/\text{ITO}$.

Caracter de noutate: sinteza de materiale noi (CZSbS a fost sintetizat recent, dar prin altă metodă) cu potențial aplicativ, care pot fi raportate pentru prima dată la nivel mondial.

F3.2.3. (2024) Sinteza și caracterizare de nanomateriale carbonice fluorescente (NCF). Metodologie: Sinteza nanomaterialelor se va face prin metode hidrotermale în flux continuu, vor fi izolate, purificate și stocate în condiții optime. Acestea vor fi caracterizate folosind tehnici disponibile în cadrul institutului cum ar fi PL, FTIR, UV-Vis, XPS, TEM.

F3.2.4. (2025) Sinteza și caracterizare de nanocompozite hibride de tip [ion metalic-NCF]. Metodologie: Sinteza sistemelor hibride de tip [ion metalic-NCF] se va realiza prin metode clasice (difuzie lentă, evaporare lentă sau tratament hidrotermal) aplicate în sinteza combinațiilor complexe. Toate materialele obținute vor fi caracterizate folosind tehnici disponibile în cadrul institutului, cum ar fi PL, FTIR, UV-Vis, XPS, TEM, SEM, BET.

F3.2.5. (2026) Testarea și optimizare nanocompozitelor hibride de tip [ion metalic-NCF] în aplicații de conversie eficientă a radiației solare. 2026. Metodologie: Prepararea și testarea celulelor fototermale se vor realiza prin metode clasice. Celule fototermale vor fi preparate prin dispersia în apă și/sau diverși solvenți polari a materialelor obținute în activitatea **F3.2.4.**, urmată de iradierea cu lumină solară. Prepararea și testarea celulelor fotovoltaice se vor realiza utilizându-se facilitățile și experiența deja existente în cadrul institutului, în conformitate cu tipul celulei solare dezvoltate și de optimizările necesare integrării nanocompozitului în celula fotovoltaică.

Caracter de noutate: Dezvoltarea de noi nanomateriale pentru conversia fototermală și ce pot fi integrate în celule solare de tip DSSC (dye-sensitized solar cell) sau de tip LSC.

Milestones 3.2: Retete pentru sinteza de NCF și nanocompozite hibride, celule solare cu eficiențe ridicate

T.L.3.3. Aplicațiile materialelor compozite bazate pe polimeri conductori, grafenă și/sau dicalcogenuri în domeniul conversiei energiei.

F3.3.1. (2023) Electrode transparent pe bază de grafenă. Depunere și caracterizare optică, structurală, morfologică și electrică. Metodologie: se vor utiliza ca metode de depunere spin coating-ul, drop casting, PLD și/sau CVD.

F3.3.2. (2024) Straturi din materiale 2D pe bază de dicalcogenuri ale metalelor de tranziție și/sau mixte cu donori polimerici și noi acceptori din grafenă funcționalizată cu polimeri conductori (RGO-POT). Depunere și caracterizare optică, structurală, morfologică și electrică. Metodologie: se vor utiliza ca metode de depunere spin coating-ul și/sau Maple.

F3.3.3. (2025) Strat buffer pe bază de grafenă și/sau grafenă/polimer conductor pentru structuri de celula solară hibridă organic : nanoparticule semiconductoare. Metodologie: se vor utiliza ca metode de depunere spin coating-ul și/sau Maple.

F3.3.4 (2026) Structura de celula solară cu strat activ din dicalcogenuri ale metalelor de tranziție și/sau mixt cu acceptor din grafena funcționalizată (RGO-POT). Realizare și caracterizare. Metodologie: se vor utiliza ca metode de depunere spin coating-ul și/sau MAPLE.

F3.3.5. (2026) Structura de celulă solară hibridă organic-nanoparticule semiconductoare cu strat buffer din grafenă și/sau grafenă-polimer conductor. Metodologie: se vor utiliza ca metode de depunere spin coating-ul și/sau MAPLE.

Caracter de noutate: utilizarea stratului buffer pe bază de grafenă și/sau grafenă funcționalizată cu polimeri conductor; structură de celulă solară hibridă organic-nanoparticule semiconductoare cu strat buffer din grafenă și/sau grafenă-polimer conductor.

Milestones 3.3: procedee de sinteza de materiale compozite bazate pe polimeri conductori, grafenă și/sau dicalcogenuri

T.L.3.4. Dezvoltarea de materiale, tehnologii și concepte pentru dispozitive termoelectrice cu aplicații la temperaturi înalte (peste 800 °C) în vederea creșterii eficienței energetice.

F3.4.1. (2023) Investigarea posibilelor soluții pentru îmbunătățirea proprietăților TE a aliajelor Full Heusler pe bază de Fe. Metodologie: implică proiectarea și testarea de noi substituții care să conducă la creșterea valorilor coeficientului Seebeck și scăderea conductibilității termice a aliajelor de tipul Fe_2TiSn și producerea de materiale TE de tip p și n, și respectiv utilizarea unor tehnici numerice avansate de calcul precum și metode semiempirice pentru proiectarea unor aliaje HEA transformabile în materiale bi sau chiar trifazice conținând cel puțin o fază Heusler.

F3.4.2. (2024) Dezvoltarea unor compozite pe bază de aliaje half-Heusler și HEA având conductibilități termice reduse prin tehnici de nanostructurare. Aliajele TE “half-Heusler” au proprietăți electrice bune (S, σ) dar și conductibilități termice ridicate. Utilizarea unor tehnici avansate de metalurgia a pulberilor (sinterizare asistată) pentru nanostructurarea aliajelor și/sau formarea unor nanocompozite este strategia propusă pentru a introduce noi centre de împrăștiere pentru reducerea conductibilității termice. Metodologie: implică proiectarea și testarea unor noi tipuri de incluziuni care să conducă la creșterea ZT, precum diferiți oxizi sau carburi cu bandă interzisă largă, semimetale (e.g. WC), sau faze magnetice (e.g. $\text{BaFe}_{12}\text{O}_{19}$) pentru realizare de materiale de tip p și n cu proprietăți TE și termomecanice compatibile.

F3.4.3 (2025-2026) Realizarea a cel puțin un dispozitiv demonstrativ TE pe baza materialelor selectate cu operare la temperaturi de cel puțin 800 °C. Având în vedere temperaturile înalte de operare propuse care depășesc chiar și pe cele ale GTE-urilor utilizate în cadrul surselor de energie din vehiculele “deep space” se va realiza un studiu adecvat al compatibilității din punct de vedere termochimic și termomecanic al acestor materiale cu diverse materiale avansate dezvoltate pentru realizarea contactelor și izolațiilor electrice. Astfel, vor fi dezvoltate atât noi tehnologii de îmbinare a materialelor în module termoelectrice, cât și noi tehnologii de design pentru GTE. Metodologie: implică pe de o parte utilizarea unor tehnici inovatoare de conectare directă (cum este FAST) sau alternativ de brazare în câmp de microunde și pe de altă parte dezvoltarea unor noi concepte de design (sisteme multistrat, castelații, etc.) validate cu sprijinul simulărilor numerice prin metoda elementelor finite (FEM). Pe baza acestora va fi realizat și validat în laborator un demonstrator pentru un GTE (TRL4). Se urmărește că atât producerea materialelor cât și procesarea ulterioară a acestora să se facă prin tehnologii scalabile pentru producția de serie.

Caracter de noutate: i) utilizarea unor metode de inducere a convergenței benzilor de energie prin substituții, ii) prin formarea acestora în urma unor tratamente termice din compoziția unor aliaje HEA; iii) vor fi dezvoltate atât noi tehnologii de îmbinare a materialelor în module termoelectrice, cât și noi tehnologii de design pentru GTE.

Milestones 3.4: demonstrator TE pe baza materialelor selectate cu operare la temperaturi de 800 °C

[T.L.3.5. Compozite 2D-2D și 2D-3D pentru producerea de \$\text{H}_2\$ prin splitarea fotocatalitică a apei.](#)

F3.5.1. (2023) Investigarea oxicarburilor pe bază de Ti pentru producerea de H_2 prin reacția de splitare fotocatalitică a apei. Metodologie: o serie de compozite semiconductori-oxicarburi pe bază de titan vor fi preparate prin tratament hidrotermal în prezența de TMAOH. Toate materialele preparate vor fi investigate prin metode de spectroscopie optică (UV-Vis) și vibrațională (IR și Raman). Alte tehnici de caracterizare precum BET, XPS, XRD, TEM sau SEM vor fi utilizate pentru a determina structura și morfologia acestor materiale.

F3.5.2. (2024) Investigarea compozitelor de tipul MXene-semiconductori pentru producerea de H_2 prin reacția de splitare fotocatalitică a apei. Metodologie: Compozitele de tipul MXene-semiconductori vor fi preparate utilizând în special metode solvotermale de sinteză. Compozitele vor fi investigate prin metode de spectroscopie optică (UV-Vis) și vibrațională (IR și Raman). Alte tehnici de caracterizare precum BET, XPS, XRD, TEM sau SEM vor fi utilizate pentru a determina structura și morfologia acestor materiale.

F3.5.3. (2025) Proof-of-concept al materialelor sintetizate în fazele F3.5.1 și F3.5.2 pentru reducerea CO_2 la produse cu valoare adăugată cum ar fi CO, metanol sau metan și reducerea N_2

cu producere de amoniac. Metodologie: în scopul realizării etapei de optimizare, vor fi realizate o serie de experimente care vor stabili configurația cea mai bună a fotoreactorului (aranjamentul geometric sursă de radiații luminoase-pat fotocatalitic, dar și evoluția puterii de iradiere la lungimi de undă specifice) și care sunt parametrii optimi de reacție. Procesul de reducere a protonilor (cu formare de H₂) nu va fi considerată reacție țintă având în vedere că astfel de transformări vor concura întotdeauna cu procesele de reducere a CO₂, dar va fi folosită drept reacție standard pentru evaluarea fotoactivității materialelor. Se vor realiza și experimente de reducere fotocatalitică a azotului la amoniac pentru a determina eficiența fotocatalitică și în această reacție.

F3.5.4. (2026) *Proof-of-concept* al materialelor sintetizate în fazele F3.5.1 și F3.5.2 pentru reacții de degradare a compușilor contaminanți. Metodologie: vor fi realizate o serie de experimente de degradare fotocatalitică a unor compuși contaminanți, poluanți prezenți în apele reziduale, cum ar fi: methylene blue, methyl orange, bisphenol A, rhodamine B sau diclofenac. Prezența speciilor reactive oxidative (OH⁻, O₂⁻ și HOO[•]), reponsabile de inițierea proceselor de oxidare a compușilor poluanți, se va evidenția utilizând tehnici specifice, cum ar fi spectroscopia EPR. În cazul reacției de reducere a azotului, din nou, procesul de reducere a protonilor (cu formare de H₂) nu va fi considerată reacție țintă, dar va fi folosită drept reacție standard pentru evaluarea fotoactivității materialelor.

Caracter de noutate: noi sisteme fotocatalitice, 2D și/sau 3D, pentru producerea de H₂ din apă și demonstrarea *Proof-of-concept* al materialelor sintetizate în alte reacții fotocatalitice de interes internațional, cum ar fi reducerea de CO₂, reducerea de N₂ și reacții de fotodegradare a compușilor contaminanți (exemplu: methylene blue, methyl orange, bisphenol A, rhodamine B, diclofenac, etc.).

Milestones 3.5: rețete de preparare a compozitelor 2D-3D; mekansim de reacție; conversii ridicate

B. Soluții moderne pentru stocarea energiei

T.L.3.6. Procese microstructurale de interfață în baterii pe bază de ioni alcalini

F3.6.1. (2023-2024) Compuși K_xMO₂ și/sau Na_xMnO₂ cu M=Mn substituit cu ioni de metale tranziționale pentru catod KIB. Metodologie: Sinteza chimică (hidrotermală, coprecipitare) și caracterizarea morfostructurală (e.g. XRD, SEM, TEM) a compușilor sintetizați, înainte și după ciclarea electrochimică; caracterizarea proprietăților electrochimice ale compușilor selectați folosind dispozitive test (microbaterii în fază solidă, celule plate).

F3.6.2. (2024) Studii microscopice și spectroscopice asupra proceselor fizico-chimice la interfețele electrod-electrolit. Metodologie: Investigații microstructurale și spectroscopice avansate folosind *metode analitice noi și avansate* de caracterizare: TEM/HRTEM *in situ* și *operando*, EELS, EDS, EPR, XPS.

F3.6.3. (2025-2026) Compuși micști Na_xK_yMO₂ cu M=Mn substituit cu ioni de metale tranziționale pentru catod NKIB. Metodologie: Sinteza chimică și caracterizarea compușilor micști A_xMO₂, înainte și după ciclarea electrochimică folosind tehnici microstructurale, compoziționale și măsuratori electrice aplicate pe dispozitive test.

Caracter de noutate: i) protocol de sinteza rapid, cu consum de energie scăzut pentru noi compuși cu structură stratificată în sistemul K_xMO₂ și/sau Na_xMnO₂ pentru baterii cu ioni alcalini; ii) noi metode de caracterizare corelativă a proprietăților microstructurale și funcționale la scară nanometrică prin microscopie electronică *in situ* și *operando* la temperatura variabilă sau sub polarizare electrică; noi metode de preparare FIB a lamelor subțiri pentru observații TEM *in situ* și *operando*.

Milestones 3.6: protocol de sinteza pentru compuși K_xMO₂ și/sau Na_xMnO₂; dispozitive pentru testarea materialelor.

T.L.3.7. Noi formule, arhitecturi și soluții pentru stocarea energiei sub diverse forme

F3.7.1. (2023-2024) Identificarea de noi configurații pentru capacitatori din filme subțiri feroelectrice pentru creșterea densității de energie. Metodologie: Realizarea țintelor ceramice și a capacitatorilor

din filme subțiri prin diferite metode: sol-gel, PLD, sputtering; realizarea diferitelor configurații de electrozi top-bottom sau a diferitelor configurații FE1/FE2, AFE/FE, FE/DE, FE/RFE și evaluarea proprietăților structurale și electrice în funcție de acestea.

F3.7.2. (2025) Optimizarea structurilor multistrat pe bază de filme subțiri feroelectrice pentru creșterea densității de energie. Metodologie: Se vor efectua calcule de structură electronică-teoria funcționalului de densitate (DFT) –studiu de la materialul bulk la structuri multistrat; se va evalua polarizarea materialelor în starea bulk dar și în structura multistrat folosind atât teoria fazelor Berry cât și sarcinile Born asociate. Alinierea benzilor de energie și densitatea de stări va produce informații legate de barierele de potențial ce apar la interfețele dintre două straturi diferite. Un studiu nou care poate fi efectuat este investigarea acestor structuri într-un câmp electric aplicat folosind metoda mediului efectiv de ecranare (ESM).

F3.7.3. (2026) Realizarea și testarea unor dispozitive de tip supercapacitori pe baza unor structuri de filme subțiri feroelectrice. Metodologie: Folosirea unor structuri de filme subțiri feroelectrice care au demonstrat în etapele anterioare proprietăți superioare (densități de energie mari, rezistență la câmpuri electrice mari, cu cicluri rapide de încărcare/descărcare, etc.) pentru a testa diferite tipuri de electrozi (tip metal și arie) precum și diferite conexiuni serie și paralel între acestea. Dispozitivele obținute vor fi testate pentru a evalua caracteristicile specifice domeniului de stocare de energie: evaluarea energiei de încărcare/descărcare; eficiență; timpul de descărcare, rezistența la cicluri repetate de încărcare/descărcare; stabilitate termică.

Caracter de noutate: Sunt propuse noi abordări pentru creșterea performanțelor capacitorilor în stare solidă: alăturarea de două sau mai multe filme subțiri cu proprietăți electrice diferite: polarizare, constantă dielectrică, rezistivitate. Acestea pot induce câmpuri interne mari în straturile feroelectrice. Milestones 3.7: structurile multistrat pe bază de filme subțiri feroelectrice optimizate; dispozitive de tip supercapacitori

T.L.3.8. Compozite de tip polimer conductor/grafenă și polimer conductor/dicalcogenuri și heterostructuri de tip dicalcogenuri/grafenă: sinteză și proprietăți fizico-chimice.

F3.8.1. (2023) Sinteza și proprietățile fizico-electrochimice ale compozitelor de tip polimer conductor/grafenă. Metodologie: polimerizare radicalică a o-toluidinei în prezența oxidului de grafenă, urmată de un proces de reducere a GO la rGO.

F3.8.2. (2023) Sinteza și caracterizarea heterostructurilor WS₂/grafenă. Metodologie: Pulverizare catodică cu magnetron, urmată de un proces de sulfurare.

F3.8.3. (2023) Obținerea directă a heterostructurilor MoS₂/grafenă pe suprafețe mari. Metodologie: Pulverizare catodică cu magnetron, urmată de sulfurare.

F3.8.4. (2023) Sinteza și proprietățile fizico-electrochimice ale compozitelor binare de tip polimer conductor/WS₂ și polimer conductor/MoS₂ - Metodologie: polimerizare radicalică a o-toluidinei în prezența WS₂ și respectiv MoS₂.

F3.8.5. (2024) Sinteza chimică și proprietățile fizico-chimice ale heterostructurilor MoS₂-WS₂ și MoS₂-WS₂/grafenă. Metodologie: combinarea metodei de exfoliere în lichide a unuia dintre dicalcogenuri în absența și respectiv prezența RGO succedată de sinteza chimică (de ex. hidrotermală) a celei de a doua dicalcogenuri.

F3.8.6. (2025) Depunerea heterostructurilor omogene de MoS₂/WS₂ și MoS₂/WS₂/grafenă prin metode fizice. Studiul variației proprietăților fizico-chimice cu numărul de straturi atomice. Metodologie: Pulverizare catodică din ținte de MoS₂ și WS₂ cu variația temperaturii substratului, și dacă este necesară, o singură sulfurare la finalul depunerii și nu după fiecare depunere a metalului de tranziție, cu controlul cantității de oxigen rezidual în incinta de tratament termic, eliminând astfel posibilitatea contaminării cu oxigen datorate scoaterii probei din incintă după fiecare depunere.

Caracter de noutate: i) funcționalizarea oxidului de grafenă redus (RGO) cu poli(o-toluidină) (POT) și ilustrarea potențialului acestui compozit ca material de electrod în domeniul supercapacitorilor; ii)

Folosirea pulverizării catodice din ținte de MoS₂ și WS₂ cu variația temperaturii substratului, și dacă este necesară, o singură sulfurare la finalul depunerii;

F3.8.7. (2024) Sinteza și proprietățile fizico-chimice ale compozitului binar MoS₂-WS₂/polimer conductor. Metodologie: polimerizare radicalică a o-toluidinei în prezența heterostructurii MoS₂-WS₂.

F3.8.8. (2025) Sinteza compozitelor ternare de tip RGO/polimer conductor/WS₂ și RGO/polimer conductor/ MoS₂ și procesele de degradare ale compozitelor bazate pe RGO, polimer conductor și dicalcogenuri sub acțiunea radiațiilor ionizante UV. Metodologie: polimerizarea radicalică a o-toluidinei în prezența MoS₂, WS₂ și RGO și evaluarea influenței radiațiilor UV.

F3.8.9. (2025) Sinteza, proprietățile fizico-electrochimice și aplicațiile compozitelor ternare de tip RGO/polimer conductor/WS₂ ca material activ de electrod în celulele supercapacitorilor. Metodologie: interacția compozitului RGO/polimer conductor cu dicalcogenurile de tip WS₂; preparare electrozilor conținând compozitul ternar și testarea în celulele supercapacitorilor.

F3.8.10. (2025) Sinteza, proprietățile fizico-electrochimice și aplicațiile compozitelor ternare de tip RGO/polimer conductor/MoS₂ ca material activ de electrod în celulele supercapacitorilor. Metodologie: interacția compozitului RGO/polimer conductor cu dicalcogenurile de tip MoS₂; preparare electrozilor conținând compozitul ternar și testarea în celulele supercapacitorilor.

F3.8.11. (2026) Sinteza, proprietățile fizico-electrochimice și aplicațiile compozitelor ternare de tip RGO/polimer conductor/ MoS₂-WS₂ ca material activ de electrod în celulele supercapacitorilor. Metodologie: interacția compozitului RGO/polimer conductor cu heterostructură MoS₂-WS₂; preparare electrozilor conținând compozitul ternar și testarea în celulele supercapacitorilor.

Caracter de noutate: i) sinteza compozitelor ternare și utilizarea acestora ca materiale de electrod în celulele supercapacitorilor; ii) sinteza compozitelor ternare și utilizarea materialelor ternare de tip RGO /polimer conductor/ MoS₂-WS₂ ca material de electrod în celulele supercapacitorilor; iii) metoda de sinteza a compozitelor ternare și procesul de degradare indus de iradierea UV.

Milestones 3.8: Retete de sinteza pentru diferite heterostructuri, compozite binare sau ternare de tip RGO/polimer conductor/WS₂

[T.L.3.9. Materiale funcționalizate stocatoare de hidrogen pentru aplicații în energie regenerabilă.](#)

F3.9.1. (2023) Nanomateriale stocatoare de hidrogen cu conținut ridicat de H₂ și proprietăți stocatoare optimizate bazate pe amestecuri de hidruri complexe. Metodologie: Se vor prepara amestecurile de hidruri complexe prin măcinare în moara cu bile, sinteza chimică în soluție, reacții de metateză, desolvatarea aducților cu eteri. Se vor studia compozițiile, fazele și morfologia nanocompozitelor prin difracție de raze X, SEM/TEM, EDAX, FTIR. Se vor analiza proprietățile cinetice și termodinamice de absorbție/desorbție de hidrogen prin metoda Sievert (volumetrică). Se va urmări corelarea între proprietățile stocatoare de hidrogen și datele structurale/compoziționale în vederea optimizării proprietăților stocatoare.

F3.9.2. (2024-2025) Nanocompozite hidruri complexe/matrici carbonice funcționalizate pentru stocarea eficientă a H₂, obținute prin măcinare, impregnare din soluție sau din topitură. Metodologie: Matricile carbonice nanoporoase vor fi sintetizate pornind de la silice mezoporoasă de tip MSU-H, MSU-F, SBA-15, MCM-48 etc. prin infiltrare de sucroză în silice, piroliza și eliminarea silicei prin tratare cu HF sau NaOH. Funcționalizarea carbonului nanoporos se va face prin tratarea cu săruri de metal tranzițional și tratament ulterior în flux de gaz. Incluziunea hidrurilor complexe în matrici carbonice nanoporoase funcționalizate va fi realizată prin trei metode: măcinare în moara cu bile, impregnare din soluție și/sau impregnare din topitură. Hidrurile complexe optimizate obținute anterior vor fi introduse în suporturile nanoporoase sintetizate, iar efectul asupra capacității reversibile de stocare a H₂ va fi studiat (cinetica și termodinamica de stocare de hidrogen). Se vor studia compozițiile, fazele și morfologia suporturilor și a hidrurilor impregnate în suportii nanoporoși prin difracție de raze X, BET, SEM/TEM, EDAX, FTIR. Se vor corela rezultatele obținute în studiile

de hidrogenare (metoda volumetrică) cu structura și capacitatea porozității intrinseci a materialului și a tipului de hidruură utilizată în vederea optimizării proprietăților de stocare.

F3.9.3. (2026) Materiale nanoporoase funcționalizate derivate din compuși metal-organici de tip MOF, pentru stocarea sustenabilă a H₂. Metodologie: Se vor prepara MOF-uri pe bază de TMⁿ prin tratament al sărurilor de metale tranziționale cu acizii dicarboxilici de tip tereftalic. Suportii nanoporoși carbonici vor fi sintetizați prin colapsarea structurilor MOF-TM ca urmare a tratamentului de piroliză (900°C, N₂). Incluziunea hidrurilor complexe sintetizate anterior în matricile carbonice nanoporoase funcționalizate rezultate ca și colapsare a structurilor MOF va fi realizată prin trei metode: macinare în moara cu bile, impregnare din soluție și/sau impregnare din topitură. Metodele utilizate pentru investigarea morfologiei suportilor nanoporoși și a hidrurilor impregnate vor fi: difracția de raze X, BET, SEM/TEM, EDAX, FTIR. Cinetica și termodinamica adsorbției de hidrogen pentru hidrurile înglobate în suportii nanoporoși se va corela cu porozitatea și tipul de funcționalizare a suportului nanoporos și cu tipul de hidruuri complexe înglobate.

Caracter de noutate: i) dezvoltarea de sisteme originale de hidruuri complexe cu cationi sau anioni micști LiH-Mg(BH₄)₂-Ca(BH₄)₂, LiBH₄-NaZn(BH₄)₃ sau LiBH₄-NaZn₂(BH₄), MgH₂-NaBH₄, LiNH₂-MgH₂-M(BH₄)_n (M=Na, Ca, etc.); ii) funcționalizarea acestora cu grupări electron-donoare ex. -NH₂) și cu nanoparticule metalice vor fi investigate pentru prima oară; iii) investigarea cineticii și termodinamicii de stocare de hidrogen în vederea optimizării proprietăților stocatoare va fi realizată folosind un design al experimentelor inovativ.

Milestones 3.9: Procedee de sinteza pentru nanocompozite hidruuri complexe/matrici carbonice funcționalizate; capacitati de adsorptie a hidrogenului

O sinteza a milestoneurilor PC3 este prezentata in Schema 2.



Schema 2. Sinteza milestoneurilor de atins in cadrul proiectului PC3

Diagrama Gantt a PC3 pe cele doua directii de cercetare este prezentata mai jos|:

TL/Faze	2023	2024	2025	2026	TL/Faze	2023	2024	2025	2026
TL 3.1	[Green bar]				TL3.6	[Blue bar]			
F3.1.1	[Green bar]				F3.6.1	[Blue bar]			
F3.1.2	[Green bar]				F3.6.2	[Blue bar]			
F3.1.3	[Green bar]				F3.6.3	[Blue bar]			
TL3.2	[Green bar]				TL3.7	[Blue bar]			
F3.2.1	[Green bar]				F3.7.1	[Blue bar]			
F3.2.2	[Green bar]				F3.7.2	[Blue bar]			
F3.2.3	[Green bar]				F3.7.3	[Blue bar]			
F3.2.4	[Green bar]				TL3.8	[Blue bar]			
F3.2.5	[Green bar]				F3.8.1	[Blue bar]			
TL3.3	[Green bar]				F3.8.2	[Blue bar]			
F3.3.1	[Green bar]				F3.8.3	[Blue bar]			
F3.3.2	[Green bar]				F3.8.4	[Blue bar]			
F3.3.3	[Green bar]				F3.8.5	[Blue bar]			
F3.3.4	[Green bar]				F3.8.6	[Blue bar]			
F3.3.5	[Green bar]				F3.8.7	[Blue bar]			
TL3.4	[Green bar]				F3.8.8	[Blue bar]			
F3.4.1	[Green bar]				F3.8.9	[Blue bar]			
F3.4.2	[Green bar]				F3.8.10	[Blue bar]			
F3.4.3	[Green bar]				F3.8.11	[Blue bar]			
TL 3.5	[Green bar]				TL3.9	[Blue bar]			
F3.5.1	[Green bar]				F 3.9.1	[Blue bar]			
F3.5.2	[Green bar]				F 3.9.2	[Blue bar]			
F3.5.3	[Green bar]				F 3.9.3	[Blue bar]			
F3.5.4	[Green bar]								
PRODUCERE de ENERGIE					STOCARE de ENERGIE				

Infrastructura. Valoarea totală a echipamentelor de ultima generație din INCDFM depășește deja 35.000k €, astfel că dispune de toate laboratoarele și echipamentele pentru buna desfășurare a activităților din PC3.

- Laborator de preparare: metode de sinteză (sinterizare clasică, SPS, presare la cald și sinterizare în câmp de microunde; co-precipitare, hidrotermal); depuneri de straturi subțiri prin MBE, CVD, ALD PLD, pulverizare în RF și DC cu magnetron, evaporare în vid, MAPLE; depuneri de straturi subțiri prin metode de tip printing (doctor blade, pulverizare și piroliza, ink-jet); depuneri de straturi subțiri prin metode chimice (centrifugare, scufundare în soluție și extragere) sau electrochimice;
- Laboratoare complexe de caracterizare structurală și morfologică, incluzând XRD pentru pulberi și straturi subțiri (echipamente de la Bruker, Rigaku și Anton-Parr, cu facilități de variere a temperaturii), SEM (mai multe echipamente), AFM/PFM/STM/MFM/Confocal, TEM (2 echipamente JEOL din care unul cu corector sferic de aberații pe partea de analiză; includ și tehnici conexe cum ar fi EDS, EELS, tomografie de electroni, etc.).
- Laboratoare de analize chimice incluzând XPS, ICP-MS, TOF-SIMS, fluorescență de raze X, GC-MS, HPLC-MS și detectori optici și electrochimici, GC-cuplat cu TCD, FID și BID, LA-ICP-MS, aparat de fizisorbție și chemisorbție, determinarea proprietăților oxido-reductoare (TPR/TPO/TPD), determinarea proprietăților acido-bazice prin adsorbție de molecule sondă.
- Laboratoare de spectroscopii optice (absorbție/transmisie, foto-, electro- și termoluminiscentă, Raman și Micro-Raman, SERS, FTIR, elipsometrie, spectroscopie de rezonanță a plasmonilor de suprafață (SPR), alte tehnici optice de caracterizare, acoperind un domeniu larg de lungimi de undă, din UV până în IR mijlociu).

Mai multe informații despre infrastructura INCDFM se pot găsi pe pagina web a INCDFM, <https://infim.ro>, la secțiunea Facilități și Servicii sau pe site-ul "European Research Infrastructures System" <https://eiris.eu/>. Pe acest site INCDFM apare cu 7 infrastructuri extinse de cercetare, însumând 214 echipamente de cercetare.

Echipamentele a fi achiziționate din bugetul PC3 sau parțial (prin partajare cu PC1, PC2 și PC4) sunt prezentate alături de justificări în tabelul următor:

Echipament	Justificare si Caracteristici (pe scurt)	Pret aproximativ (RON cu TVA)	PC
Sistem automat de depunere serigrafica	Necesar pentru realizare de senzori de gaze pentru aplicații de mediu, siguranță și securitate a populației.	120000	PC1 PC2 PC3
Upgrade EELS Gatan Quantum SE	Include: 1. Instalarea unui sistem Dual EELS (hardware+software) prevăzut cu obturator și cameră de achiziție rapidă pentru achiziție simultană de spectre în două domenii spectrale (145.000 USD) 2. Sistem Fast Spectrum Imaging – permite achiziția de harti elementale cu rata mare de achiziție pentru evitarea degradării/contaminării probei în timpul achiziției. (56.000 USD) Exista oferta din 10.02.2021 din partea producatorului echipamentului, Gatan.	1309000	PC1 PC2 PC3
Cryo-Mill	Macinarea la temperaturi criogenice (aproape de temperatura azotului lichid) permite obtinerea de nanopulberi de materiale sau metale ductile (de exemplu cupru) care în cazul macinării la temperatura camerei se lipesc de peretii vasului de reacție și ai bilelor și nu pot fi macinate. Un alt avantaj este posibilitatea macinării bucatilor mari	180000	PC2 PC3

	de material sau cu consistenta moale care devin fragile la temperatura azotului lichid.		
Electro-Discharge Machine cu comanda numerica	In cadrul proiectelor cu orientare aplicativa desfasurate in INCDFM (de exemplu EUROfusion) este necesara prelucrarea de precizie inalta a unor componente si piese realizate din materiale greu prelucrabile mecanic, cum sunt materiale si compozite refractare cu W sau Mo, oteluri superdure sau HEA (high entropy alloys). Acestea nu se pot prelucra decat utilizand echipamente de tip EDM (prin electro-eroziune) cu comanda numerica (pentru a atinge nivelurile de precizie solicitate de parteneri.	1080000	PC2 PC3
Echipamente de retea si de calcul pentru dezvoltarea centrului de calcul numeric existent in INCDFM; diverse licente software	In ultimii ani au fost achizitionate servere si statii de calcul (blade-uri) pentru cresterea capacitatii de calcul numeric pentru dezvoltarea de modele teoretice si simulari in domeniul materialelor. Se intentioneaza extinderea acestuia prin achizitia de noi blade-uri si a unui server de control. Licentele sunt necesare pentru achizitia si prelucrarea datelor experimentale	300000	PC1 PC2 PC3 PC4
Sistem de analiza termica diferentiala si analiza termogravimetrica tip Themis	Aceasta cerere vizeaza inlocuirea sistemului actual TG/DSC/TGA, system aflat in operare din 2007 si care actualmente este scos din productie (nu va mai fi posibila achizitia de piese de schimb pentru el).	475000	PC3
Laser in verde (532 nm) cu accesorii	Pentru completarea sistemului Raman ce deservește INCDFM, astfel incat sa permita excitarea cu 4 lungimi de unda diferite	300000	PC1 PC2 PC3
Upgrade sistem STM la sistem SPM	Permite diversificarea modurilor de lucru (AFM, PFM, MFM, si altele), cu potential de extindere catre temperaturi joase	1000000	PC1 PC2 PC3
Ultracentrifuga	Pentru separarea de nanoparticule din suspensii	45000	PC3
Potentiostat/galvanostat	Pentru efectuarea experimentelor de electrochimie. Dotate cu module bipotentiostat si pentru spectroscopia de impedanta electrochimica. Compatibilitate cu microscopul electrochimic de baleiaj.	250000	PC1 PC3
Sistem automat de procesare si micro-sectionare	Pentru sectionarea plachetelor de Si, SiO2/Si, sticla, printre altele.	360000	PC1 PC2 PC3
Sistem depunere straturi perovskiti micsti prin evaporare	Necesar pentru producerea straturilor de halizi metal-organici care intra in componenta celulelor solare de tip perovskit	1400000	PC2 PC3
Spectrometru de rezonanta magnetica nucleara (RMN) de solide	RMN-ul este un instrument indispensabil în fizică, biologie și chimie. RMN-ul furnizează o perspectivă rară asupra unor aspecte precum structura materialelor, starea și reacțiile electroliților din baterii, structura proteinelor, ș.a.m.d.	1100000	PC1 PC2 PC3 PC4
Echipament de litografie/printare 3D optica fara masti	Necesar pentru micro si nanofabricatie fara a fi necesare masti si pasi tehnologici complicati. Se utilizeaza scrierea 3 D cu laser.	1100000 (PC1 PC2 PC3 PC4
Unitate de spectroscopie vibrationala pentru studiului suprafetelor in conditii de vid ultrainalt	Necesar pentru analiza spectroscopica a suprafetelor si a adsorbatilor pe suprafete in conditii de vida inalt, pentru intelegerea reactiilor care au loc la suprafata.	1100000	PC1 PC2 PC3 PC4

1.4. Structura echipei de cercetare

(se va prezenta structura întregii echipe de cercetare; se vor prezenta și se va descrie rolul a maxim 5 membri cheie ai echipei proiectului; se vor prezenta și justifica posturile vacante pe proiect dacă este cazul; se vor anexa la propunerea de Proiect CV-ul extins al responsabilului proiectului și CV-urile sintetice ale persoanelor cheie prezentate pe maxim ½ pagină)

Echipea de cercetare a fost judicios construită astfel încât să asigure îndeplinirea tuturor sarcinilor atribuite. Dintre aceștia aproape 64% sunt cercetători cu titlul de doctor în științe, 25 % doctoranzi și restul ingineri și tehnicieni. Membrii echipei PC3 au o experiență anterioară în domeniile cercetării care reprezintă scopul acestei propuneri, dar cu siguranță participarea în acest proiect va contribui la îmbunătățirea expertizei în domeniul producerii și stocării energiei a fiecărui membru în parte. Această expertiză poate fi punctul de plecare și pentru depunerea de noi proiecte, și de asemenea va crea oportunitatea pentru tinerii cercetători să își completeze calificarea și cunoștințele lucrând în domeniul interdisciplinar al proiectului, care este o îmbinare între fizică, chimie, electrochimie, cataliză, electrocataliză, știința materialelor și inginerie.

Rolul directorului de proiect și a celor 5 membri cheie ai echipei de cercetare:

Dr. Mihaela Florea (PhD din 2003, Universite Catolique de Leuven, Belgia), CS1, șef Laborator 80, Materiale Catalitice și Cataliză, din cadrul INCDFM- **Directorul PC3**. Are experiență în coordonarea de proiecte naționale (11 proiecte ca PI) și internaționale (3 proiecte ca PI: MERA-Net, JRP, NATO). Dr. Florea va avea întreaga responsabilitate pentru orice aspect legat de desfășurarea proiectului atât științific (deține expertiza în preparare de materiale organice și sau anorganice, compozite 2D/3D, filme subțiri, în procese pentru producerea de energie, celule fotovoltaice, fotocataliza, dar și stocare de energie (stocare de H₂, sinteza de materiale pentru baterii și supercapacitori) cât și administrativ. În scopul atingerii tuturor obiectivelor, dr. Florea va facilita comunicarea între responsabilii de faze prin organizarea de reuniuni ori de câte ori este nevoie, dar cel puțin o dată la 3 luni pentru a discuta gradul de avansare al activităților, dificultățile întâmpinate astfel încât să se ia decizii în timp util fără a afecta desfășurarea în timp a activităților. Organizarea activităților și luarea deciziilor imediate sunt delegate liderilor de TL, care vor fi responsabili de asigurarea raportării la timp a progreselor înregistrate și informarea directorului de proiect.

Dr. Ioana Pintilie (CS1, PhD din 1996, Universitatea din București, Facultatea de Fizica) – membru cheie și responsabil TL1 și TL3 – va coordona activitățile dedicate studiului de materiale pentru producerea de materiale perovskitice și pe bază de carbon și grafenă pentru celule fotovoltaice.

Dr. Aurelian Gâlca (CS1, PhD din 2006, Universitatea din Twente, Olanda) – membru cheie și responsabil TL2 și TL4- va coordona activitățile dedicate elaborării și caracterizării celulelor fotovoltaice pe bază de kesterit și de heterostructuri cu grafenă și dicalcogenide ale metalelor tranziționale.

Dr. Andrei Galatanu (CS1, PhD din 2000, Universitatea din București, Facultatea de Fizica) – membru cheie și responsabil TL5 și TL7- cu o expertiză de peste 20 de ani în fenomene de transport în fizica stării condensate și materiale avansate pentru condiții extreme va coordona activitățile pentru dezvoltarea de materiale, tehnologii și concepte pentru dispozitive termoelectrice cu aplicații la temperaturi înalte (peste 800 °C), dar și a noilor materiale oxidice stratificate în sistemul K_xMO₂ și/sau Na_xMnO₂, cu M = ioni ai metalelor de tranziție, pentru electrozii bateriilor reîncărcabile.

Dr. Marcela Socol (CS1, PhD din 2010, Universitatea din București, Facultatea de Fizica) – **director adjunct al PC3**, membru cheie și responsabil TL8, TL9 și TL10 - va coordona activitățile de sinteză și asamblare de straturi subțiri cu diferite compoziții prin diferite metode, caracterizarea acestora printr-o paletă largă de tehnici de caracterizare și va fi responsabil pentru creșterea eficienței de stocare a supercapacitorilor.

Dr. Stefan Neatu (CS1, PhD din 2010, Universitatea din București, Facultatea de Chimie)– membru cheie și responsabil TL6 și TL11 - va coordona activitățile ce privesc sinteza compozitelor 2D și/sau 3D pentru producerea eficientă a H₂ prin splitarea fotocatalitică a apei, dar și pentru sinteza materialele stocatoare de hidrogen și caracterizarea acestora.

Toți responsabilii menționați dețin expertiza în domeniul TL și prin prisma coordonării de proiectele la nivel național și internațional au capacitatea de a gestiona activitățile atât din punct de vedere științific cât și administrativ. În scopul asigurării unei conduceri operative și eficiente a PC3, și pentru a suplini lipsa temporară a directorului de proiect se nominalizează ca director adjunct dr. Marcela Socol, de altfel membru cheie în echipa proiectului.

Toți cercetătorii implicați în PC3 vor contribui activ la implementarea cu succes a tuturor obiectivelor, furnizând în mod constant întreaga lor expertiză în sprijinul proiectului. În plus, toate fazele au câte un lider (vezi secțiunea 1.3) cu expertiza corespunzătoare respectivei activități, care va fi responsabil pentru dezvoltarea și implementarea la timp a acelei activități și va raporta/se va consulta direct cu responsabilul de TL.

2. Structura bugetului proiectului (maxim 2 pagini)

(se vor avea în vedere cheltuielile cu salariile, materiile prime și materialele, cheltuieli cu echipamentele și serviciile necesare realizării proiectului, inclusiv de acces la infrastructură, cheltuieli cu deplasări, diseminare, brevetare, cheltuieli indirecte – corelate cu specificul institutului; corelarea bugetului cu obiectivele proiectului, schema de realizare a proiectului cu evidențierea fazelor și a termenelor de predare a fazelor conform modelele tabele anexate)

Alocarea și folosirea resurselor se va realiza conform fazelor proiectului prevăzute în Schema de Realizare. Bugetul solicitat pentru fiecare categorie de cheltuieli a fost judicios calculat ținând cont de necesitățile materiale și financiare ale proiectului. Astfel, cheltuielile din bugetul public, în afară de cheltuielile de personal ce reprezintă 43% din valoarea totală și care sunt justificate conform efortului total de personal, mai sunt prevăzute cheltuieli de logistica în valoare de 14% din valoarea totală. Cheltuielile cu logistica cuprind: (i) cheltuieli de materiale în valoare de 3610128 lei (4% din bugetul total) prevăzute pentru achiziționarea de materiale, precursori pentru sinteza de materiale, sticlărie de laborator și alte piese de schimb (ii) echipamente în valoare de 9% necesare pentru achiziționarea de echipamente prezentate în secțiunea 1 și (iii) cheltuielile cu serviciile în valoare de (~1%) sunt destinate asistenței tehnice, consultanță și audit financiar, dar și pentru prezentarea rezultatelor în *open science*. Cheltuielile de deplasare reprezintă 1% din bugetul total, vor fi utilizate pentru participarea la conferințe internaționale pentru a ne prezenta rezultatele obținute la diverse saloane de invenție. Cheltuielile indirecte sunt în procent de ~43 % și vor fi folosite pentru cheltuieli generale de administrație.

3. Managementul riscului (maxim 1 pagină)

(Riscuri asociate implementării activităților proiectului și plan de contingență, se consideră riscul și impactul asupra execuției proiectului)

Pe lângă riscurile generale prezentate în PN, au fost identificate riscuri științifice asociate implementării activităților din PC3 pentru care au fost formulate măsuri de combatere:

TL	Riscuri identificate	Impact	Măsuri de remediere și de atenuare/eliminarea riscurilor
TL1	Depunerile electrochimice de ETM mezoporos pot să nu conducă la proprietăți mai bune ale PSC-urilor față de TiO ₂ mezoporos depus chimic prin spray-ere	Mediu	În paralel cu depunerile electrochimice se vor fabrica straturi ETM mezoporos și prin metode chimice, pornind de la brevetul deținut de INCDFM ²⁸ în vederea adaptării condițiilor de depunere a noile compoziții de SnO ₂ și TiO ₂ dopat.
TL2	Sinteza chimică poate rezulta în obținerea a unui complex de faze cristaline.	Mediu	Obținerea de faze cuaternare cristaline prin metode complementare (ex. solvothermală).
TL3	Dificultăți în ceea ce privește integrarea în celule fototermale și/sau fotovoltaice a tuturor nanocompozitelor hibride de tip [ion metallic-NCF] sintetizate, fapt ce ar întârzia diseminarea finală a rezultatelor.	Mediu	Stabilirea unui protocol de prescreening pentru selectarea și prioritizarea, în vedere optimizării, a unui set de maxim 5-6 nanocompozite hibride care au cele mai promițătoare rezultate preliminare.
TL4	Controlul morfologiei stratului mixt; injectare/colectare eficientă a purtătorilor de către electrozi.	Mediu	Propunerea mai multor metode pentru depunerea stratului mixt; testarea mai multor rapoarte donor: acceptor; testarea mai multor solvenți; testare unor diferite configurații de electrozi.
TL5	Neobținerea funcționalității dorite prin tehnologii ușor scalabile.	Redus	Utilizarea unor tehnologii alternative, mai greu scalabile la producția de serie.
TL6	MXenele sunt instabile în mediile apoase în care există oxigen dizolvat, iar în unele cazuri, oxidarea are loc chiar prin hidroliză.		Strategiile de îmbunătățire a fotoactivității pentru utilizarea spectrului solar vor consta în adăugarea (în cantități ultra-mici) de metale nobile (Pt sau Pd).
TL7	Dificultăți privind sinteza chimică și stabilitatea compușilor într-o fază cristalină compatibilă cu mecanismul de intercalare a ionilor alcalini mobili.	Redus	Modificarea parametrilor de sinteză chimică, utilizarea a cel puțin două metode de sinteză (coprecipitare, hidrotermală). Explorarea unor morfologii și faze structurale alternative privind împachetarea octaedrelor de MnO ₆ , compatibile cu mecanismul de intercalare a ionilor alcalini.
TL8	Să nu se obțină structuri de supercapacitori care să aibă performanțele așteptate (densități de energie >100 J cm ⁻³ care să funcționeze în câmpuri aplicate > 1MV cm ⁻¹ , cu cicluri rapide de încărcare/descărcare).	Mediu	Realizarea și testarea unor structuri realizate din materiale cu proprietăți diferite: feroelectrice (FE), antiferoelectrice, dielectrice și relaxori și tehnici diferite de obținere ale acestora; modelarea teoretică, care va contribui la optimizarea structurilor multistrat: alegerea grosimilor optime a straturilor componente; inserarea unui electrod metalic intermediar; alegerea electrodului metalic.
TL9	Metoda de sinteza utilizată să conducă la obținerea unui compozit de tip POT/GO.	Mediu	Reducerea GO la RGO în prezența cu hidrazină.
TL10	Heterostrutura MoS ₂ -WS ₂ să conțină forme morfologice de tip baghete și foi.	Mediu	Utilizarea metodei de exfoliere în lichide a straturilor de WS ₂ combinate cu metoda hidrotermala a MoS ₂ , când estimăm obținerea unor heterostructuri de tip MoS ₂ nanostraturi/WS ₂ nanostraturi.
TL11	Cinetica adsorbției/desorbției de hidrogen pentru amestecurile de hidruri complexe ce prezintă destabilizare termodinamică este lentă.	Mediu	La amestecul de hidruri se vor adăuga catalizatori (pe bază de Ni, Pd, etc.), prin utilizarea de metode chimice în soluție sau mecano-chimice –pentru îmbunătățirea cineticii adsorbției/desorbției de H ₂ .

4. Impactul proiectului (maxim 2 pagini)

(se vor evidenția: impactul științific, economico-social, de mediu)

PC3 va avea un impact major asupra a trei direcții:

Impact științific. PC3 este un proiect ambicios și complex în același timp, având o componentă de cercetare fundamentală și una aplicativă, prin urmare impactul științific va fi discutat la cele două nivele. Astfel, la nivel fundamental PC3: i) va dezvolta **noi metode și instrumente de investigație științifică avansate** și de ultima oră (e.g. tehnici *in situ* și *operando*) pentru a contribui la acumularea de noi cunoștințe privind elucidarea la scară nanometrică a proceselor fizico-chimice ce influențează performanțele materialelor abordate în domeniul stocării și livrării energiei electrice; ii) va realiza **înțelegerea proceselor fizico-chimice** ce au loc în timpul sintezei materialelor funcționale avansate; iii) va **forma cercetători în domenii multidisciplinare**, cu accent pe tema fierbinte legată de soluții pentru producerea și stocarea energiei, relevantă la nivel național, european și internațional. La nivel aplicativ PC3 **va livra soluții viabile și va dezvolta tehnologii noi de producere și stocare a energiei electrice** cu impact la nivel național și internațional.

Impact economico-social: Cercetările întreprinse în cadrul PC3 au un important impact economic prin identificarea unor materiale alternative accesibile fără risc de aprovizionare (resurse limitate sau concentrate în zone conflictuale) și a unor tehnologii de fabricație ieftine pentru producerea și stocarea energiei electrice. Astfel, se va evita utilizarea de materii prime critice, limitate de factori geostrategici, generând un impact economic major pentru aplicațiile industriale, oferindu-se posibilitatea de creare de noi locuri de muncă prin aplicarea rezultatelor în industrie. De asemenea, un impact social semnificativ este de așteptat asupra vieții de fiecare zi a noastră a tuturor datorită soluțiilor și tehnologiilor propuse în PC3 în ceea ce privește generarea și stocarea de energie verde.

Impact de mediu: PC3 este construit în acord cu "[European Green Deal's Circular Economy Action Plan](#)" care urmărește o producere sustenabilă și utilizarea materiilor prime secundare (obținute prin reciclare). Proiectul contribuie la identificarea de soluții alternative ecologice pentru producerea și stocarea energiei electrice, cu impact pozitiv, în sensul reducerii utilizării combustibililor fosili și a amprentei de carbon în atmosferă. Reducerea CO₂ este o prioritate centrală în Europa și în întreaga lume în contextul încălzirii globale și a problemelor de deficit de energie, cel puțin două dintre prioritățile CE fiind atinse în timpul implementării sale ([Green Deal](#) și [An Economy that works for people](#)) pe lângă binecunoscutul [Acord de la Paris](#) privind schimbările climatice.

Proiectul are ca obiectiv implicarea a cât mai multor tineri cercetători din cadrul institutului, dar și a tinerilor absolvenți ai universităților/facultăților de profil din România sau din străinătate, oferindu-le oportunitatea să aprofundeze și să câștige expertiza în domeniul de cercetare multidisciplinar a proiectului, astfel PC3 va avea și un **impact educativ**.

5. Planul de diseminare și exploatare a rezultatelor (maxim 3 pagini)

(se vor evidenția: rezultate estimate; efecte ale aplicării rezultatelor estimate; grup țintă al rezultatelor cercetării; modul de diseminare a rezultatelor; modul de exploatare/valorificare a rezultatelor estimate; proprietate intelectuală)

Printre rezultatele estimate în cadrul PC3 menționăm doar câteva în cele ce urmează:

i. Studii comparative de performanță fotovoltaică și stabilitate în timp a celulelor fotovoltaice rezultate din variația compozițională– identificare compoziții optime pentru fabricarea de celule cu performanțe durabile; ii. Punerea la punct a unui protocol de preparare a probelor subțiri folosind SEM-FIB pentru operando TEM în studiul materialelor pentru baterii și al altor tipuri de materiale funcționale; iii. Identificarea fenomenelor la interfață care determină evoluția în timp a proprietăților specifice ale bateriilor și supercapacitorilor precum capacitatea, rata de descărcare, etc; iv. Identificarea unor condiții de sinteză economice și rapide, cu consum de energie scăzut pentru obținerea materialelor cu structură cristalină stratificată pentru catozi pe bază de K_xMnO_2 , Na_xMnO_2 și $K_xNa_yMnO_2$, în care ionii de Mn vor fi substituiți parțial cu ioni ai metalelor tranzitionale pentru îmbunătățirea proprietăților electrochimice ale materialelor; v. compozite pe bază de aliaje half-Heusler și HEA având conductibilități termice reduse prin tehnici de nanostructurare pentru obținerea unui demonstrator TE.

Sumarul indicatorilor de rezultat ce vor fi livrați sunt următorii: i) 37 lucrări pentru publicare în jurnale ISI; ii) 13 cereri de brevet de invenție; iii) 160 produse/esantioane/obiecte fizice/materiale; iv) 16 tehnologii; v) 15 metode/procedee; vi) 26 rețete; vii) 33 studii; viii) 26 documentații; ix) 57 scheme; x) 12 formule; xi) 2 demonstratoare.

Efecte ale aplicării rezultatelor estimate se vor cuantifica prin utilizarea acestor materiale funcționale avansate și materiale compozite în tehnologii și aplicații de larg interes.

Grupul țintă principal al rezultatelor cercetării este reprezentat de cercetători în domeniile PC3, dar și de departamentele de dezvoltare din industria specifică, capabile să asimileze aceste heterostructuri și materiale compozite noi pentru producerea și stocarea de energie. Proiectul va contribui la progresul cercetărilor în domeniul bateriilor, supercapacitorilor și a celulelor fotovoltaice prin implicarea unor instrumente și metode științifice de ultimă oră (microscopie electronică la rezoluție atomică, investigații la scară nanometrică și atomică în condiții *in situ* și *operando*), rezultatele obținute adresându-se atât comunității științifice cât și mediului industrial din domeniul stocării energiei electrice (e.g. Rombat, Varta).

În ceea ce privește producerea de H_2 , în România există 13 producători industriali de hidrogen, dar care utilizează combustibili fosili. Dintre aceștia Chimcomplex și Liberty Galati au și proiecte de producere de hidrogen cu energie regenerabilă. Romgaz și OMV Petrom vor investi într-un proiect comun de producție a hidrogenului într-un parc eolian în Dobrogea. Romgaz dorește să producă electricitate utilizând parcuri de panouri fotovoltaice și hidrogenul verde produs prin electroliza să fie utilizat la propriile mașini. În toate aceste cazuri stocarea hidrogenului produs reprezintă un aspect important, hidrurile fiind o soluție viabilă și ieftină.

De asemenea, printre grupurile țintă vizate trebuie menționați tinerii și personalul cu experiența susceptibili de a fi atrași către cariera de cercetare, dar și publicul larg pentru a scoate în evidență contribuția cercetării la rezolvarea problemelor societale curente.

Modul de diseminare a rezultatelor i) publicare în reviste de top - accesul deschis (Open acces) va fi preferat dacă resursele financiare necesare vor exista; ii) afișarea pe site-ul INCDFM a titlurilor și abstractele publicațiilor rezultate; iii) articole în presa scrisă pentru popularizarea științei, pentru a

scoate în evidență contribuția cercetării la rezolvarea problemelor societale curente; iv) participarea la conferințe internaționale și naționale, dar și stagii de lucru; v) participarea la târguri și expoziții de inovație cu produsele și demonstratoarele obținute în cadrul PC3.

Modul de exploatare/valorificare a rezultatelor estimate va consta din înglobarea acestor materiale funcționale avansate noi și tehnologii dezvoltate în produse de înaltă tehnologie de către entități industriale interesate.

Protecția proprietății intelectuale joacă un rol esențial în procesul de cercetare, fiind atât o strategie defensivă față de concurenți cât și o posibilă sursă de venituri în viitor. Gestionarea oricăror cunoștințe rezultate din cercetările efectuate se va face în sensul protecției know-how-ului și, în general, a protejării drepturilor de proprietate intelectuală a cercetătorilor implicați, conform cu reglementările în vigoare și procedurilor stabilite în cadrul INCDFM.

6. Alte informații care promovează / susțin proiectul – dacă este cazul (maxim 1 pagină)

(se pot face trimiteri la documente programatice; se pot anexa propunerii de proiect expresii de interes, scrisori suport din partea unor agenți economici sau autorități publice si locale, etc.)

Scopul acestui proiect este de mare actualitate și poate oferi soluții fezabile la criza energetică globală declanșată de invazia Ucrainei de către Rusia în februarie 2022. Astfel, este imperativ necesar să depășim dependența de combustibilii fosili prin găsirea de opțiuni alternative, durabile și regenerabile. **Nu este o sarcină ușoară!** dar prin obiectivele și activitățile planificate în acest proiect, infrastructura de care dispunem și expertiza echipei de proiect dar și prin colaborările deja antamate avem șanse mari de reușită. În acest sens partenerii noștri de la companii private precum STIMPEX S.A., S.C. MICROSIN S.R.L., SHIMADZU, S.C. APEL LASER SRL, OPTOELECTRONICA dar și de educație și cercetare cum este FACULTATEA DE CHIMIE de la Universitatea din București, ne-au transmis susținerea lor precum și expresii de interes pentru a utiliza rezultatele estimate a fi produse în cadrul acestui proiect.

Prin toate fazele și activitățile propuse, proiectul urmărește îndeplinirea obiectivului internațional de zero emisii nete până în 2050.²⁹

7. Declarațiile responsabilului de proiect

Sub sancțiunea descalificării propunerii de proiect, sau după caz, a nulității contractului de finanțare, precum și a consecințelor legale decurgând din furnizarea de date și informații false sau incorecte, declar pe propria răspundere:

1. Proiectul propus nu a fost, nu este finanțat în cadrul altor programe.
2. Da

Bibliografie – (maxim 2 pagini)

1. Chu, S. & Majumdar, A. Opportunities and challenges for a sustainable energy future. *Nature* **488**, 294–303 (2012).
2. International Energy Agency. <https://www.iea.org/>.
3. Liu, Z., Lau, S. P. & Yan, F. Functionalized graphene and other two-dimensional materials for photovoltaic devices: device design and processing. *Chem. Soc. Rev.* **44**, 5638–5679 (2015).

4. Geim, A. & Grigorieva, I. Van der Waals Heterostructures. *Nature* **499**, 419 (2013).
5. Das, S., Pandey, D., Thomas, J. & Roy, T. The Role of Graphene and Other 2D Materials in Solar Photovoltaics. *Adv. Mater.* **31**, 1802722 (2019).
6. Peters, J. F., Peña Cruz, A. & Weil, M. Exploring the Economic Potential of Sodium-Ion Batteries. *Batteries* vol. 5 (2019).
7. Hasa, I. *et al.* Challenges of today for Na-based batteries of the future: From materials to cell metrics. *J. Power Sources* **482**, 228872 (2021).
8. Chen, M. *et al.* NASICON-type air-stable and all-climate cathode for sodium-ion batteries with low cost and high-power density. *Nat. Commun.* **10**, 1480 (2019).
9. Basak, S. *et al.* Operando Transmission Electron Microscopy Study of All-Solid-State Battery Interface: Redistribution of Lithium among Interconnected Particles. *ACS Appl. Energy Mater.* **3**, 5101–5106 (2020).
10. Yang, L. *et al.* Perovskite lead-free dielectrics for energy storage applications. *Prog. Mater. Sci.* **102**, 72–108 (2019).
11. Boni, A. G. *et al.* Negative Capacitance and Switching Dynamics Control Via Non-Ferroelectric Elements. *ACS Appl. Energy Mater.* **5**, 3307–3318 (2022).
12. Hoffmann, M. *et al.* Unveiling the Double-Well Energy Landscape in a Ferroelectric Layer. *Nature* **565**, 464 (2019).
13. Yi, S.-H., Chan, Y.-C., Mo, C.-L., Lin, H.-C. & Chen, M.-J. Enhancement of energy storage for electrostatic supercapacitors through built-in electric field engineering. *Nano Energy* **99**, 107342 (2022).
14. Novoselov, K. S., Mishchenko, A., Carvalho, A. & Castro Neto, A. H. 2D materials and van der Waals heterostructures. *Science (80-.)*. **353**, aac9439 (2016).
15. Comanescu, C. Recent Development in Nanoconfined Hydrides for Energy Storage. *International Journal of Molecular Sciences* vol. 23 (2022).
16. Kim, M. *et al.* MOF-derived nanoporous carbons with diverse tunable nanoarchitectures. *Nat. Protoc.* (2022) doi:10.1038/s41596-022-00718-2.
17. Kumar, R., Joanni, E., Singh, R. K., Singh, D. P. & Moshkalev, S. A. Recent advances in the synthesis and modification of carbon-based 2D materials for application in energy conversion and storage. *Prog. Energy Combust. Sci.* **67**, 115–157 (2018).
18. Palade, P., Comanescu, C., Guran, C., Chihaiia, V., Coldea, I. D. Hydrogen-storing materials based on mixtures of amides-hydrides-borohydrides. (2017).
19. El Khouja, O. *et al.* Bulk and surface characteristics of co-electrodeposited Cu₂FeSnS₄ thin films sulfurized at different annealing temperatures. *J. Alloys Compd.* **906**, 164379 (2022).
20. Giraldo, S. *et al.* Progress and Perspectives of Thin Film Kesterite Photovoltaic Technology: A Critical Review. *Adv. Mater.* **31**, 1806692 (2019).
21. Lin, J.-T. *et al.* Vertical 2D/3D Heterojunction of Tin Perovskites for Highly Efficient HTM-Free Perovskite Solar Cell. *ACS Appl. Energy Mater.* **4**, 2041–2048 (2021).
22. Saliba, M. *et al.* Incorporation of rubidium cations into perovskite solar cells improves photovoltaic performance. *Science (80-.)*. **354**, 206–209 (2016).
23. Fox, M. A. & Dulay, M. T. Heterogeneous photocatalysis. *Chem. Rev.* **93**, 341–357 (1993).
24. Neațu, F. *et al.* Degenerated TiO₂ Semiconductor Modified with Ni and Zn as Efficient Photocatalysts for the Water Splitting Reaction. *ChemCatChem* **12**, 4642–4651 (2020).
25. Li, X. *et al.* Applications of MXene (Ti₃C₂T_x) in photocatalysis: a review. *Mater. Adv.* **2**, 1570–1594 (2021).
26. Lin, H.-J. *et al.* Unlocking photoredox selective organic transformation over metal-free 2D transition metal chalcogenides-MXene heterostructures. *J. Catal.* **391**, 485–496 (2020).

27. Badr, H. O. *et al.* Bottom-up, scalable synthesis of anatase nanofilament-based two-dimensional titanium carbo-oxide flakes. *Mater. Today* **54**, 8–17 (2022).
28. PINTILIE I; TOMULESCU A G; LEONAT L N; STANCU V; BESLEAGA S C; TOMA V; DUMITRU V G; PINTILIE L. MESOPOROUS LAYER FOR PEROVSKITE SOLAR CELLS AND FABRICATION METHOD. (2019).
29. <https://www.iea.org/reports/net-zero-by-2050>.

tele și informațiile privind propunerea de proiect sunt reale, exacte, corecte.

SCHEMA DE REALIZARE A PROIECTULUI COMPONENT 3

Noi formule, arhitecturi și soluții pentru surse regenerabile de energie și stocarea energiei sub diverse forme

Faze de realizat pe toată durata proiectului component:

Nr. crt.	Luna începere/luna finalizare	Denumire fază	Valoare - lei -	Termen de predare	Ținte și indicatori de realizare
ANUL 2023					
1	1.2023-12.2023	F3.2.1. Realizarea tehnologiei de producere, elaborarea rețetelor de sinteză și caracterizarea de nanoparticule $Cu_2Zn_{1-x}Fe_xSnS_4$. Obținere de pelicule și celule test fotovoltaice.	2256360	Decembrie 2023	Tinta: Implementarea unei tehnologii de producere nanoparticule cristaline fără Cd - $Cu_2Zn(Fe)SnS_4$ Indicatori: 1 tehnologie de producere nanoparticule și coloizi; 1 rețetă de obținere nanoparticule kesterită/stanită; 1 lucrare științifică.
2	1.2023-12.2023	F3.4.1. Investigarea posibilelor soluții pentru îmbunătățirea proprietăților TE a aliajelor Full Heusler pe baza de Fe.	2256360	Decembrie 2023	Tinta: Cresterea performanțelor TE a aliajelor Full-Heusler pe baza de Fe Indicatori: 1 studiu, lucrari (min. 1), materiale (cel puțin 2 perechi p+n)

Nr. crt.	Luna începere/luna finalizare	Denumire fază	Valoare - lei -	Termen de predare	Ținte și indicatori de realizare
3	1.2023-12.2023	<p>F3.9.1. Nanomateriale stocatoare de hidrogen cu conținut ridicat de H₂ și proprietăți stocatoare optimizate bazate pe amestecuri de hidruri complexe.</p>	2256360	Decembrie 2023	<p>Ținta: Obținerea de noi materiale stocatoare de hidrogen pe baza de amestecuri de hidruri complexe de tipul LiH-Mg(BH₄)₂-Ca(BH₄)₂, LiBH₄-NaZn(BH₄)₃ sau LiBH₄-NaZn₂(BH₄), MgH₂-NaBH₄, LiNH₂-MgH₂-M(BH₄)_n (M=Na, Ca, etc.)</p> <p>Indicatori: 3 rețete; 1 procedeu; 1 lucrare trimisa spre publicare</p>

Nr. crt.	Luna începere/luna finalizare	Denumire fază	Valoare - lei -	Termen de predare	Ținte și indicatori de realizare
4	1.2023-12.2023	F3.8.1. Sinteza și proprietățile fizico-electrochimice ale compozitelor de tip polimer conductor/ grafena.	2256360	Decembrie 2023	<p>Ținte: i) sinteza compozitului poli(o-toluidina)/oxid de grafena redus și evidențierea proprietăților optice, structurale și electrochimice; și ii) evaluarea potențialului acestor compozite pentru aplicații în domeniul supercapacitorilor.</p> <p>Indicatori: 1 documentație, 1 studiu, 1 rețetă de sinteză, 1 schema de reacții, 1 lucrare trimisă spre publicare la o revistă ISI</p>
5	1.2023-12.2023	F3.8.2. Sinteza și caracterizarea heterostructurilor WS ₂ /grafena.	2256360	Decembrie 2023	<p>Ținte: Sinteza heterostructurilor WS₂/grafena prin depunerea fizică din starea de vapori, urmată de sulfurizare și caracterizarea proprietăților fizico-chimice ale acestora.</p> <p>Indicatori: 1 documentație, 1 studiu, 1 lucrare trimisă spre publicare la o revistă ISI</p>

Nr. crt.	Luna începere/luna finalizare	Denumire fază	Valoare - lei -	Termen de predare	Ținte și indicatori de realizare
6	1.2023-12.2023	F3.8.3. Obținerea directă a heterostructurilor MoS ₂ /grafena pe suprafețe mari.	2256360	Decembrie 2023	Ținte: Obținerea heterostructurilor MoS ₂ /grafenă pe suprafețe mari direct din procesul de depunere folosind pulverizarea catodică cu magnetron Indicatori: 1 documentație, 1 lucrare trimisa spre publicare la o revistă ISI
7	1.2023-12.2023	F3.3.1. Electrode transparent pe baza de grafen. Depunere și caracterizare optică, structurală, morfologică și electrică.	2256359	Decembrie 2023	Ținte: Depunere stratului subțire transparent conductor pe baza de grafen. Caracterizare optică, structurală, morfologică și electrică Indicatori: 1 documentație, 1 studiu, 1 lucrare trimisa spre publicare la o revistă ISI

Nr. crt.	Luna începere/luna finalizare	Denumire fază	Valoare - lei -	Termen de predare	Ținte și indicatori de realizare
8	1.2023-12.2023	<p>F3.8.4. Sinteza și proprietățile fizico-electrochimice ale compozitelor binare de tip polimer conductor/WS₂ și polimer conductor/MoS₂.</p>	2256359	Decembrie 2023	<p>Ținte: i) sinteza și proprietățile optice, structurale și electrochimice ale compozitelor binare de tip polimer conductor/WS₂ și polimer conductor/MoS₂; ii) evaluare potențialului acestor compozite pentru aplicații în domeniul supercapacitorilor Indicatori: 1 documentație, 1 studiu, 2 rețete de preparare, 2 schema cu reacțiile sintezei materialelor compozite, 1 lucrare trimisă spre publicare la o revistă ISI</p>

Nr. crt.	Luna începere/luna finalizare	Denumire fază	Valoare - lei -	Termen de predare	Ținte și indicatori de realizare
9	1.2023-12.2023	F3.1.1. Optimizare proprietăți stratului ETM compact/mezoporos pe bază de TiO ₂ , SnO ₂ și r-GO depuse prin metode de arie mare.	2256359	Decembrie 2023	Tinta: Elaborarea procedurilor optime de depunere pe arie mare și a rețetelor de obținere a ETM compact și mezoporos pe bază de TiO ₂ , SnO ₂ și r-GO Indicatori: 3 studii 2 metode/procedee 1 lucrare trimisă 9 celule solare

Nr. crt.	Luna începere/luna finalizare	Denumire fază	Valoare - lei -	Termen de predare	Ținte și indicatori de realizare
10.	1.2023-12.2023	F3.5.1. Investigarea compozitelor de tipul MXene-semiconductori pentru producerea de H ₂ prin reacția de splitare fotocatalitică a apei.	2256359	Decembrie 2023	<p>Ținte: Designul și optimizarea metodelor de sinteză a compozitelor de tipul MXene-semiconductori; Caracterizarea exhaustivă a compozitelor sintetizate și determinarea proprietăților morfologice și structurale; Atingerea unor valori ridicate ale AQE pentru reacția de producere a hidrogenului prin procesul de splitare a apei; Evidențierea mecanismului de reacție pe baza corelațiilor dintre caracteristicile compozitelor dezvoltate și proprietățile fotocatalitice ale acestora.</p> <p>Indicatori: 1 procedeu; 1 lucrare trimisa ; 10 probe, 1 cerere de brevet</p>

Nr. crt.	Luna începere/luna finalizare	Denumire fază	Valoare - lei -	Termen de predare	Ținte și indicatori de realizare
SUBTOTAL anul 2023			22563596		i) 10 lucrări pentru publicare; ii) 1 cerere de brevet; iii) 21 produse; iv) 1 tehnologii v) 4 metode; vi) 7 rețete; vii) 8 studii; viii) 5 documentații; ix) 3 scheme.
ANUL 2024					
1	1.2024-12.2024	F3.2.2. Obținerea de coloizi cu compoziție a nanoparticulelor cu substituție a Sn cu Sb. Evaluarea compatibilității și funcționalității ca strat absorbant de lumină în celule solare.	2256360	Decembrie 2024	Tinta: Producerea de nanoparticule calcogenice fără Sn (substituție cu Sb). Indicatori: 1 rețetă de obținere nanoparticule calcogenice fără Sn; 1 cerere brevet; 1 lucrare științifică.

Nr. crt.	Luna începere/luna finalizare	Denumire fază	Valoare - lei -	Termen de predare	Ținte și indicatori de realizare
2	1.2023-12.2024	F3.7.1. Identificarea de noi configurații pentru condensatori din filme subțiri ferroelectrice pentru creșterea densității de energie.	2256360	Decembrie 2024	Tinte: Dezvoltarea unor structuri multistrat din materiale polarizabile electric cu caracter ferroelectric, antiferroelectric, relaxor sau dielectric Indicatori: ≥ 10 eșantioane; ≥ 5 rețete pentru obținerea multistraturilor; 2 metode de obținere; ≥ 2 documentații, ≥ 1 studiu, 1 lucrare.
3	1.2024-12.2024	F3.4.2. Dezvoltarea unor compozite pe baza de aliaje half-Heusler și HEA având conductibilitate termică redusă prin tehnici de nanostructurare.	2256360	Decembrie 2024	Tinte: Obținerea de compozite nano-structurate pe baza de aliaje half-Heusler și HEA Indicatori: 1 studiu, 1 lucrare, materiale (cel puțin 2 perechi p+n)

Nr. crt.	Luna începere/luna finalizare	Denumire fază	Valoare - lei -	Termen de predare	Ținte și indicatori de realizare
4	1.2024-12.2024	F3.2.3 Sinteză și caracterizare de nanomateriale carbonice fluorescente (NCF).	2256360	Decembrie 2024	<p>Ținte: (1) Studiu aprofundat de literatură urmărind progresul recent din domeniu sintezei de sisteme hibride de tip [ion metalic-NCF]. (2) Studierea proprietăților structurale, de compoziție și optice ale nanocompozitelor sintetizate. (3) Evaluare rezultatelor obținute și includerea lor într-o lucrare științifică de tip short communication.</p> <p>Indicatori: 2 documentații, 3 studii, 1 lucrare trimisă, 12 formule, 20 scheme 10–20 obiecte fizice, 2-3 tehnologii și/sau metode</p>

Nr. crt.	Luna începere/luna finalizare	Denumire fază	Valoare - lei -	Termen de predare	Ținte și indicatori de realizare
5	1.2024-12.2024	F3.8.5. Sinteza chimica si proprietatile fizico-chimice ale heterostructurilor MoS ₂ -WS ₂ si MoS ₂ -WS ₂ /grafena.	2256360	Decembrie 2024	Ținte: sinteza chimica si caracterizarea fizico-chimica a heterostructurilor MoS ₂ -WS ₂ si MoS ₂ -WS ₂ /grafena Indicatori: 1 documentație, 1 reteta de preparare, 1 scheme cu reactiile de sinteza ale heterostructurilor, 1 lucrare trimisa spre publicare la o revistă ISI
6	1.2024-12.2024	F3.8.7. Sinteza si proprietatile fizico-chimice ale compozitului binar MoS ₂ -WS ₂ /polimer conductor.	2256360	Decembrie 2024	Ținte: sinteza compozitului binar MoS ₂ -WS ₂ /polimer conductor si evidentierea proprietatilor fizico-chimice Indicatori: 1 documentație, 1 reteta de preparare, 1 schema de reactii, 1 lucrare trimisa spre publicare la o revistă ISI

Nr. crt.	Luna începere/luna finalizare	Denumire fază	Valoare - lei -	Termen de predare	Ținte și indicatori de realizare
7	1.2024-12.2024	<p>F3.3.2. Strat-uri din materiale 2D pe baza de dicalcogenuri ale metalelor de tranziție și/sau mixte cu donori polimerici și noi acceptori din grafena funcționalizată cu polimeri conductori (RGO-POT). Depunere și caracterizare optică, structurală, morfologică și electrică.</p>	2256359	Decembrie 2024	<p>Ținte: i) depunere de straturi din material 2D pe baza de dicalcogenide ale metalelor de tranziție - caracterizare optică, structurală, morfologică și electrică; și ii) depunere de straturi mixte: donori polimerici și acceptori din material 2D (grafena funcționalizată cu polimeri conductori) - caracterizare optică, structurală, morfologică și electrică. Indicatori: 1 documentație, 1 studiu, 1 lucrare trimisă spre publicare la o revistă ISI</p>

Nr. crt.	Luna începere/luna finalizare	Denumire fază	Valoare - lei -	Termen de predare	Ținte și indicatori de realizare
8	1.2023-12.2024	<p>F3.6.1. Compusi K_xMO_2 si/sau Na_xMnO_2 cu M=Mn substituit cu ioni de metale tranzitionale pentru catod KIB. (Responsabil: Dr. A. M. Vlaicu si Dr. C. Ghica)</p>	2256359	Decembrie 2024	<p>Tinta: Sinteza si caracterizare complexa de noi materiale oxidice stratificate in sistemul K_xMO_2 si/sau Na_xMnO_2, cu M = ioni ai metalelor de tranzitie, pentru electrozii bateriilor reincarcabile cu ioni alcalini. Indicatori: 1 reteta de produs, 1 manuscris trimis</p>
9	1.2024-12.2024	<p>F3.6.2. Studii microscopice si spectroscopice asupra proceselor fizico-chimice la interfetele electrod-electrolit.</p>	2256359	Decembrie 2024	<p>Tinta: Determinarea mecanismelor fizico-chimice la scara nanometrica ce limiteaza proprietatile electrochimice ale materialelor sintetizate. Indicatori: 1 procedeu de preparare FIB; 1 studiu asupra proceselor de interfata electrod-electrolit; 1 manuscris trimis.</p>

Nr. crt.	Luna începere/luna finalizare	Denumire fază	Valoare - lei -	Termen de predare	Ținte și indicatori de realizare
10	1.2024-12.2024	<p>F3.5.2. Investigarea compozitelor de tipul MXene-semiconductori pentru producerea de H₂ prin reacția de splitare fotocatalitică a apei.</p>	2256359	Decembrie 2024	<p>Ținte: Designul și optimizarea metodelor de sinteză a compozitelor de tipul MXene-semiconductori; Caracterizarea exhaustivă a compozitelor sintetizate și determinarea proprietăților morfologice și structurale; Atingerea unor valori ridicate ale AQE pentru reacția de producere a hidrogenului prin procesul de splitare a apei; Evidențierea mecanismului de reacție pe baza corelațiilor dintre caracteristicile compozitelor dezvoltate și proprietățile fotocatalitice ale acestora.</p> <p>Indicatori: 1 procedeu; 1 lucrare trimisa ; 10 probe, 1 cerere de brevet</p>

Nr. crt.	Luna începere/luna finalizare	Denumire fază	Valoare - lei -	Termen de predare	Ținte și indicatori de realizare
		SUBTOTAL anul 2024	22563596		i) 10 lucrări pentru publicare; ii) 2 cereri de brevet de invenție; iii) 32 produse; iv) 2 tehnologii v) 4 metode; vi) 9 rețete; vii) 7 studii; viii) 7 documentații; ix) 22 scheme; x) 12 formule
ANUL 2025					
1	1.2024-12.2025	F3.1.2. Sinteza și caracterizarea de halizi perovskiți obținuți prin inginerie compozițională. Realizare și testarea preliminară a PSC-urilor.	2256360	Decembrie 2025	Tinta: Elaborarea procedurilor de depunere pe arii mari, stabilirea solvenților și a rețetelor de depunere/obținere a halizilor perovskiți prin inginerie compozițională. Indicatori: 7 studii 2 metode/procedee 2 lucrări trimise 30 celule solare

Nr. crt.	Luna începere/luna finalizare	Denumire fază	Valoare - lei -	Termen de predare	Ținte și indicatori de realizare
2	1.2025-12.2025	F3.7.2. Optimizarea structurilor multistrat pe baza de filme subțiri feroelectrice pentru creșterea densității de energie.	2256360	Decembrie 2025	<p>Ținte: Modelarea teoretică a structurilor multistrat cu proprietăți electrice diferite; modelarea teoretică va contribui la optimizarea structurilor multistrat: alegerea grosimilor optime a straturilor componente; inserarea unui electrod metalic intermediar; alegerea electrodului metalic.</p> <p>Indicatori: 1 produs informatic; ≥ 5 eșantioane; 2 documentații, ≥ 2 studii, 1 lucrare submisă.</p>

Nr. crt.	Luna începere/luna finalizare	Denumire fază	Valoare - lei -	Termen de predare	Ținte și indicatori de realizare
3	1.2024-12.2025	F3.9.2 Nanocompozite hidruri complexe / matrici carbonice funcționalizate pentru stocarea eficientă a H ₂ , obținute prin măcinare, impregnare din soluție sau din topitura.	2256360	Decembrie 2025	Ținte: Se vor sintetiza noi suporturi carbonici nanoporosi (ca și replica a silicei nanoporoase) funcționalizati cu nanoparticule metalice și modificați cu grupări – NH ₂ sau cu substituție de N (prin tratarea în flux de NH ₃) Indicatori: 2 rețete, 2 procedee, 1 lucrare trimisă spre publicare, 1 cerere de brevet de invenție

Nr. crt.	Luna începere/luna finalizare	Denumire fază	Valoare - lei -	Termen de predare	Ținte și indicatori de realizare
4	1.2025-12.2025	F3.2.4. Sinteză și caracterizare de de nanocompozite hibride de tip [ion metalic-NCF]	2256360	Decembrie 2025	<p>Ținte: (1) Studiu aprofundat de literatură urmărind progresul recent din domeniu sintezei de nanomateriale carbonice fluorescente (NCF).(2) Sinteza de nanomateriale carbonice fluorescente. (3) Studierea proprietăților structurale, de compoziție și optice ale nanomaterialelor fluorescente sintetizate. (4) Evaluare rezultatelor obținute și includerea lor într-o lucrare științifică de tip short communication.</p> <p>Indicatori: 2 documentații, 3 studii, 1 lucrare trimisă, 10 scheme, 10–20 obiecte fizice, 4-5 tehnologii și/sau metode.</p>

Nr. crt.	Luna începere/luna finalizare	Denumire fază	Valoare - lei -	Termen de predare	Ținte și indicatori de realizare
5	1.2025-12.2025	F3.3.4 Strat buffer pe baza de grafena si/sau grafena/polimer conductor pentru structuri de celula solara hibrida organic : nanoparticule semiconductoare.	2256360	Decembrie 2025	Ținte: Depunerere de strat buffer pe baza de grafena si/sau grafena functionalizata cu polimer conductor - caracterizare optica, morfologica, structurala, electrica Indicatori: 1 documentație, 1 lucrare trimisa spre publicare la o revistă ISI
6	1.2025-12.2025	F3.8.10. Sinteza, proprietățile fizico-electrochimice si aplicațiile compozitelor ternare de tip RGO/polimer conductor/MoS ₂ ca material activ de electrod in celulele supercapacitorilor	2256360	Decembrie 2025	Ținte: sinteza, proprietatile fizico-electrochimice si aplicatiile compozitelor ternare de tip RGO/polimer conductor/MoS ₂ ca material activ de electrod in celulele supercapacitorilor Indicatori: 1 documentație, 2 retete de preparare, 2 scheme de reactii, 1 tehnologie de laborator, 1 lucrare trimisa spre publicare la o revistă ISI,

Nr. crt.	Luna începere/luna finalizare	Denumire fază	Valoare - lei -	Termen de predare	Ținte și indicatori de realizare
7	1.2025-12.2025	<p>F3.8.6. Depunerea heterostructurilor omogene de MoS₂/WS₂ și MoS₂/WS₂/grafena prin metode fizice. Studiul variației proprietăților fizico-chimice cu numărul de straturi atomice.</p>	2256359	Decembrie 2025	<p>Ținte: Realizarea de heterostructuri complexe de MoS₂/WS₂ și MoS₂/WS₂/grafena. Investigarea structurii morfologice și proprietăților optice ale acestora</p> <p>Indicatori: 1 documentație, 1 lucrare trimisă spre publicare la o revistă ISI, 1 cerere de brevet de invenție națională</p>

Nr. crt.	Luna începere/luna finalizare	Denumire fază	Valoare - lei -	Termen de predare	Ținte și indicatori de realizare
8	1.2025-12.2025	<p>F3.8.8. Sinteza compozitelor ternare de tip RGO/polimer conductor/WS₂ si RGO/polimer conductor/ MoS₂ si procesele de degradarea ale compozitelor bazate pe RGO, polimer conductor si dicalcogenuri sub acțiunea radiațiilor ionizante UV.</p>	2256359	Decembrie 2025	<p>Ținte: i) sinteza compozitelor ternare de tip RGO/polimer conductor/WS₂ si RGO/polimer conductor/MoS₂ si ii) investigarea modificarilor structurale si ale proprietatilor optice ale compozitelor binare si ternare sub actiunea radiatiei UV Indicatori: 1 documentație, 2 retete, 2 scheme de reactii, 1 lucrare trimisa spre publicare la o revistă ISI</p>

Nr. crt.	Luna începere/luna finalizare	Denumire fază	Valoare - lei -	Termen de predare	Ținte și indicatori de realizare
9	1.2025-12.2025	<p>F3.5.3. Proof-of-concept al materialelor sintetizate în fazele F3.5.1 și F3.5.2 pentru reducerea CO₂ la produse cu valoare adăugată cum ar fi CO, metanol sau metan și reducerea N₂ cu producere de amoniac.</p>	2256359	Decembrie 2025	<p>Ținte: Designul și optimizarea fotoreactorului pentru realizarea proceselor fotocatalitice, altele decât reacția de splitare a apei; Evidențierea parametrilor optimi de realizare a acestor reacțiilor fotocatalitice; Atingerea unor valori ridicate ale AQE pentru reacția de reducere fotocatalitică a CO₂ și a N₂.</p> <p>Indicatori: 1 foto-reactor; 1 lucrare trimisa spre publicare</p>

Nr. crt.	Luna începere/luna finalizare	Denumire fază	Valoare - lei -	Termen de predare	Ținte și indicatori de realizare
10	1.2025-12.2025	F3.8.9. Sinteza, proprietatile fizico-electrochimice si aplicatiile compozitelor ternare de tip RGO/polimer conductor/WS ₂ ca material activ de electrod in celulele supercapacitorilor.	2256359	Decembrie 2025	Ținte: sinteza, proprietatile fizico-electrochimice si aplicatiile compozitelor ternare de tip RGO/polimer conductor/WS ₂ ca material activ de electrod in celulele supercapacitorilor Indicatori: 1 documentație, 2 rețete de preparare, 2 scheme de reactii, 1 tehnologie de laborator, 1 lucrare trimisa spre publicare la o revistă ISI, 1 cerere de brevet
SUBTOTAL anul 2025			22563596		i) 10 lucrări pentru publicare; ii) 3 cereri de brevet de invenție; iii) 56 produse; iv) 5 tehnologii v) 5 metode; vi) 7 rețete; vii) 12 studii; viii) 8 documentații; ix) 15 scheme.
ANUL 2026					

Nr. crt.	Luna începere/luna finalizare	Denumire fază	Valoare - lei -	Termen de predare	Ținte și indicatori de realizare
1	1.2026-12.2026	F3.1.3. Studii de stabilitate a PSC-urilor obținute prin inginerie compozițională. Identificarea compoziției de HP cu cea mai stabilă performanță fotovoltaică.	2256360	Decembrie 2026	Tinta: Realizarea de PSC-uri de arie mare cu performanțe fotovoltaice stabile în timp. Indicatori: 1 studiu; 1 lucrare trimisa 1 brevet , 30 celule solare
2	1.2026-12.2026	F3.7.3. Realizarea și testarea unor dispozitive de tip supercapacitori pe baza unor structuri de filme subțiri feroelectrice.	2256360	Decembrie 2026	Tinte: Se vor realiza și testa conexiuni serie sau paralel între mai mulți electrozi cu scopul creșterii puterii totale de stocare de energie în structurile de filme subțiri. Indicatori: 1 schiță capacitorului multistrat; ≥ 3 obiecte fizice realizate, 1 cerere brevet de invenție.

Nr. crt.	Luna începere/luna finalizare	Denumire fază	Valoare - lei -	Termen de predare	Ținte și indicatori de realizare
3	1.2025-12.2026	F3.4.3. Realizarea a cel puțin un dispozitiv demonstrativ TE pe baza materialelor selectate cu operare la temperaturi de cel puțin 800 C.	2256360	Decembrie 2026	Tinta: Realizarea unui demonstrator GTE cu operare la cel puțin 800 °C Indicatori: 1 studiu, 1 brevet, 2 materiale, 1 tehnologie, 1 demonstrator (GTE)
4	1.2026-12.2026	F3.9.3. Materiale nanoporoase funcționalizate derivate din compuși metal-organici de tip MOF, pentru stocarea sustenabilă a H ₂ .	2256360	Decembrie 2026	Tinte: Se vor sintetiza MOF-uri pe baza de TM ⁿ⁺ (TM= metal tranzitional) și linkeri organici de tip tereftalat cu structură analogică IRMOF-x care vor genera prin piroliză ulterioară (900°C, N ₂) specii carbonice MDC-x cu caracteristici structurale unice Indicatori: 2 rețete; 2 procedee; 1 lucrare trimisă spre publicare; 1 cerere brevet de invenție

5	1.2026-12.2026	<p>F3.2.5. Testarea și optimizare nanocompozitelor hibride de tip [ion metallic-NCF] în aplicații de conversie eficientă a radiației solare. Diseminarea finală a rezultatelor.</p>	2256360	Decembrie 2026	<p>Ținte: (1) Studiu aprofundat de literatură urmărind progresul recent din domeniu celulelor de conversie fototermală și a celulelor fotovoltaice de tip DSSC (dye-sensitized solar cell) și de tip LSC (luminescent solar concentrator cell) preparate folosind nanomateriale carbonice fluorescente și corelarea cu caracteristicile structurale, de compoziție și optice ale nanomaterialelor și nanocompozitelor sintetizate și caracterizate în fazele I și II ale proiectului.(2) Prepararea, testarea și optimizare de celule de conversie fototermală și a celule fotovoltaice de tip DSSC (dye-sensitized solar cell) sau de tip LSC (luminescent solar concentrator cell) folosind nanomateriale și nanocompozite sintetizate și caracterizate în fazele I și II. (3) Evaluare</p>
---	----------------	--	---------	----------------	---

Nr. crt.	Luna începere/luna finalizare	Denumire fază	Valoare - lei -	Termen de predare	Ținte și indicatori de realizare
					<p>rezultatelor finale și includerea lor într-o lucrare științifică de tip articol științific într-un jurnal internațional cu factor de impact mai decât 5. (4) Incorporarea tehnologiilor dezvoltate în cadrul proiectului pentru conversia energiei solare în energie termică sau electrică în 1-2 cereri de brevete de invenție.</p> <p>Indicatori: 3 documentații, 4 studii, 1 lucrare trimisă, 1-2 cereri de brevete de invenție trimise, 15 scheme, 10 obiecte fizice, 4-5 tehnologii și/sau metode</p>

Nr. crt.	Luna începere/luna finalizare	Denumire fază	Valoare - lei -	Termen de predare	Ținte și indicatori de realizare
6	1.2026-12.2026	F3.3.5 Structura de celula solara cu strat activ din dicalcogenuri ale metalelor de tranzitie si/sau mixt cu acceptor din grafena functionalizata (RGO-POT). Realizare si caracterizare.	2256360	Decembrie 2026	Ținte: i) realizarea structurii de celula solara cu strat din dicalcogenuri ale metalelor de tranzitie - caracterizare optica, morfologica si electrica; si ii) realizare de structura de celula solara cu strat activ mixt avand ca acceptor grafena functionalizata - caracterizare optica, morfologica si electrica. Indicatori: 1 documentație, 1 tehnologie de laborator, 1 lucrare trimisa spre publicare la o revistă ISI

Nr. crt.	Luna începere/luna finalizare	Denumire fază	Valoare - lei -	Termen de predare	Ținte și indicatori de realizare
7	1.2026-12.2026	F3.3.5. Structura de celula solara hibrida organic-nanoparticule semiconductoare cu strat buffer din grafena si/sau grafena-polimer conductor.	2256359	Decembrie 2026	Ținte: i) realizare de structura de celula solara hibrida organic-nanoparticule semiconductoare cu strat buffer din grafena - caracterizare optica, morfologica, electrica; si ii) realizare de structura de celula solara hibrida organic-nanoparticule semiconductoare cu strat buffer din grafena-polimer conductor - caracterizare optica, morfologica, electrica. Indicatori: 1 documentație, 1 tehnologie de laborator, 1 cerere de brevet national

Nr. crt.	Luna începere/luna finalizare	Denumire fază	Valoare - lei -	Termen de predare	Ținte și indicatori de realizare
8	01.2025-12.2026	F3.6.3. Compusi micsti $\text{Na}_x\text{K}_y\text{MO}_2$ cu $\text{M}=\text{Mn}$ substituit cu ioni de metale tranzitionale pentru catod NKIB.	2256359	Decembrie 2026	Tinta: Obținerea și caracterizarea complexă a compusilor micști $\text{Na}_x\text{K}_y\text{MO}_2$, cu $\text{M}=\text{ioni de metale tranzitionale}$ pentru fabricarea catozilor bateriilor de tip NKIB Indicatori: 1 rețetă de produs, 4 obiecte fizice (pulberi nanostructurate), 1 propunere de brevet, 1 manuscris trimis, 1 demonstrator

Nr. crt.	Luna începere/luna finalizare	Denumire fază	Valoare - lei -	Termen de predare	Ținte și indicatori de realizare
9	1.2026-12.2026	F3.8.11. Sinteza, proprietatile fizico-electrochimice si aplicatiile compozitelor ternare de tip RGO/polimer conductor/ MoS ₂ -WS ₂ ca material activ de electrod in celulele supercapacitorilor.	2256359	Decembrie 2026	Ținte: Proprietatile fizico-electrochimice ale compozitelor ternare de tip RGO /polimer conductor/ MoS ₂ -WS ₂ si utilizarea acestora ca materiale de electrod in celulele supercapacitorilor Indicatori: 1 documentație, 1 tehnologie de laborator, 1 schema de reactii, 1 lucrare trimisa spre publicare la o revistă ISI
10	1.2026-12.2026	F3.5.4. <i>Proof-of-concept</i> al materialelor sintetizate în fazele F3.5.1 si F3.5.2 pentru <u>reacții de degradare a compușilor contaminanți</u> .	2256359	Decembrie 2026	Tinte: Realizarea proceselor fotocatalitice pentru degradarea compușilor contaminanți; Evidențierea parametrilor optimi de realizare a acestor reacțiilor fotocatalitice; Indicatori: 1 lucrare trimisa spre publicare; 2 produse
SUBTOTAL Anul 2026			22563596		i) 7 lucrări pentru publicare;

Nr. crt.	Luna începere/luna finalizare	Denumire fază	Valoare - lei -	Termen de predare	Ținte și indicatori de realizare
					ii) 7 cereri de brevet de invenție; iii) 51 produse; iv) 8 tehnologii v) 2 metode; vi) 3 rețete; vii) 6 studii; viii) 6 documentații; ix) 17 scheme; x) 2 demonstratoare.
		TOTAL GENERAL	50.000.000		i) 37 lucrări pentru publicare în jurna ii) 13 cereri de brevet de invenție; iii) 160 produse/esantioane/obiecte fiz iv) 16 tehnologii v) 15 metode/procedee; vi) 26 rețete; vii) 33 studii; viii) 26 documentații; ix) 57 scheme; x) 12 formule xi) 2 demonstratoare

BUGETUL PROIECTULUI COMPONENT

Categoriile de cheltuieli	Costuri estimative (lei)				
	Anul 2023	Anul 2024	Anul 2025		TOTAL pe categorii de cheltuieli
1	2	3	4		5=2+3+4
Cheltuieli salariale (cu încadrare în plafoanele din Anexa III.1) și asimilate acestora; contribuții	9808975	9808975	9808975	9808975	39235900
Cheltuielile cu deplasările	216608	216608	216608	216608	866432
Cheltuielile cu materialele, materiile prime și obiectele de inventar	902533	902533	902533	902533	3610128
Cheltuieli cu serviciile (prevăzute în Hotărârea Guvernului 134/2011)	270760	270760	270760	270760	1083040
Cheltuieli de capital	2075826	2075826	2075826	2075826	8303304
Cheltuieli indirecte (valoare estimată pentru acoperirea cheltuielilor indirecte – reprezentând 43% din total buget proiect, echivalent 85% din cheltuieli directe)	9288895	9288895	9288895	9288895	37155580
Buget anual	22563596	22563596	22563596	22563596	90254384

Nota: Baza de calcul fundamentează doar valoarea de finanțare, structura cheltuielilor din devizul cadru se întocmește de fiecare institut după necesitățile proprii, cu respectarea procentului de maxim 43% cheltuieli indirecte.